
Propriedades dos Estados de Valência em Nanoestruturas de SiGe/Si

Luís Guilherme de Carvalho Rego

Orientador: Prof Dr. José A. Brum

Este exemplar corresponde
à versão final da tese de
doutorado de Luís Guilherme
Rego, defendida e aprovada
pela Comissão Examinadora
fevereiro, 1997.
JAB

Tese apresentada ao Instituto de Física 'Gleb Wataghin',
da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos
requisitos à obtenção do Título de Doutor em Ciências -
Janeiro de 1997

UNIDADE	IFGW
N.º CHAMADA	IF/1081
	UNICAMP
	R265p
V.	Ex
TOMADA	20/3/050
PROG.	281/97
C	<input type="checkbox"/> D <input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	12/07/97
N.º CPD	

CN-00098689-3

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW- UNICAMP**

R265p

Rego, Luis Guilherme de Carvalho

**Propriedades eletrônicas de estados de valência em
nanoestruturas de SiGa/Si / Luis Guilherme de Carvalho
Rego. -- Campinas, SP: [s. n.] , 1997.**

Orientador: José Antonio Brum.

**Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas,
Instituto de Física "Gleb Wataghin".**

**1. Física do estado sólido. 2. Buracos - Semicondutores.
3. Efeito quântico de Hall. 4. Problemas de muitos corpos.
I. José Antonio Brum. II. Universidade Estadual de
Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.**

**PARECER DE APROVAÇÃO
DEFESA DE TESE DE DOUTORADO DE
LUIS GUILHERME DE CARVALHO REGO**

Data: 31 / 01 / 97

BANCA EXAMINADORA:



- Prof. Dr. José Antonio Brum (Orientador)



- Prof. Dr. Pawel Hawrylack



- Profa. Dra. Marília Junqueira Caldas



- Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira



- Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Agradecimentos

Gostaria de agradecer, em primeiro lugar, ao Professor José A. Brum pela confiança e orientação ao longo do trabalho. Igualmente, sou grato ao Dr. Paweł Hawrylak pela co-orientação e aulas de *ski*.

Agradeço à CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta monografia apresentamos um estudo das propriedades de sistemas bi-dimensionais (2D) e zero-dimensionais (0D) formados a partir de heteroestrutura $Si_{1-x}Ge_x/Si$ dopadas de tipo-p. A descrição do sistema 2D é feita em termos do Hamiltoniano de Luttinger-Kohn, incluindo-se as bandas *split-off* e os efeitos de tensão; a interação Coulombiana dos buracos entre si e com as impurezas aceitadoras ionizadas foi obtida auto-consistentemente usando-se o potencial de Hartree. Os efeitos causados por um campo magnético externo nas propriedades de transporte deste sistema foram considerados e os resultados teóricos comparados com medidas de magneto-transporte feitas em amostras de alta mobilidade. Em seguida enfocamos a interação buraco-buraco, usando a paridade destes, em lugar do spin, como bom número quântico. Mostramos que o termo que descreve a interação Coulombiana entre buracos pode ser dividido em duas componentes: uma delas que atua simplesmente na distribuição de cargas do sistema, como ocorre na interação Coulombiana entre elétrons. A outra provoca uma mudança na paridade dos buracos. A presença de um campo magnético externo revela efeitos qualitativamente distintos daqueles que são característicos dos elétrons, confinados pelo mesmo tipo de potencial. Por fim investigamos algumas das propriedades de 1 e 2 buracos confinados em pontos quânticos e sob influência do potencial atrativo de uma impureza aceitadora. A formação de estados tipo hidrogenóides com 1 (A^0) e 2 buracos (A^+) ligados à impureza foram estudados em função do confinamento e campo magnético.

Abstract

Electronic Properties of Valence States in *SiGe/Si* Nanostructures

In this work we present a study carried on the properties of p-doped *SiGe/Si* two-dimensional and 0-dimensional nanostructures. The 2D system is described in terms of the Luttinger-Kohn Hamiltonian, taking into account the split-off bands and strain effects. The Coulomb interaction of the holes among themselves and with the ionized impurities is represented by a self-consistent Hartree potential. The effects of an external magnetic field on the properties of this system were considered and the theoretical results compared with magneto-transport measurements made on high mobility *SiGe/Si* samples. In the sequence we investigate the hole-hole interaction, using the parity of holes, instead of spin, as a good quantum number. We show that the Coulomb interaction term of the hole Hamiltonian can be divided into two parts: one of them acts only on the charge distribution of the system, as in the electron case. The other flips the parity configuration of the holes and is analog to the coupling of the isospin quantum number in double-layer electron systems. A magnetic field applied to the system revealed qualitative differences in the behavior of 0-dimensional hole systems when compared to electrons submitted to the same confining potential. The effect of parity mediated hole interactions is illustrated by numerical calculations of two holes in a quantum disk. Finally we study some of the properties of 1 and 2 holes in the presence of the attractive potential of an acceptor impurity in a Quantum Dot. The formation of hydrogenic states with 1 (A^0) and 2 (A^+) holes bound to the acceptor is investigated as a function of confining potential and magnetic field.

Índice

Agradecimentos	2
Resumo	3
Abstract	4
Índice	5
1 Introdução Geral	1
2 Estrutura Eletrônica de Buracos em Poços Quânticos de $Si_{1-x}Ge_x/Si$ dopados tipo-p na presença de um Campo Magnético	6
2.1 Introdução	6
2.2 Teoria	7
2.2.a Cálculo Auto-consistente dos Estados de Valência para $B = 0$. . .	8
2.2.b Efeitos da Tensão	11
2.2.c Densidade de Estados no Plano do Poço	12
2.2.d Massa Efetiva dos Buracos	13
2.2.e Campos Magnéticos Finitos	13
2.2.f Massa Ciclotrônica	16
2.3 Resultados e Discussão	16
2.4 Sumário	25
3 Teoria de Buracos Interagentes em Nanoestruturas	26

3.1	Introdução	26
3.2	Uma Partícula	27
3.2.a	Teoria e Modelo Físico	27
3.2.b	Resultados para buracos independentes	30
3.2.c	Hamiltoniano de Buracos Interagentes	37
3.2.d	Resultados para Dois Buracos e Discussões	39
3.2.e	Sumário	45
4	Centros A^0 e A^+ em Nanoestruturas de $SiGe/Si$	47
4.1	Introdução	47
4.2	Estados de Impurezas Neutras	49
4.2.a	Impurezas hidrogenóides em semicondutores dopados tipo-n (D^0). .	49
4.2.b	Impurezas hidrogenóides em nanoestruturas dopadas tipo-p (A^0). .	50
4.2.c	O sistema A^+	54
4.3	Sumário	58
5	Conclusões	59
A	O Hamiltoniano H_{LK} em coordenadas cilíndricas e seus elementos de matriz.	63
B	Elementos de Matriz do Hamiltoniano $H = H_0 + V_{hh}$	67

Capítulo 1

Introdução Geral

O estudo das propriedades dos semicondutores teve início na década de 30, quando *Ge* e *Si* foram os primeiros a serem crescidos com pureza suficiente para que pudessem ser pesquisados. Dessa forma foram inventados os diodos e na década de 40 os transistores. Porém, até o final da década de 50 não se sabia se o *Ge*, material que produziu o primeiro transistor (Bardeen e Brattain 1948), possuía *gap* de energia direto ou indireto, dada a precariedade das amostras, técnicas experimentais e numéricas. A partir daí novos processos surgiram e outros materiais semicondutores puderam ser sintetizados com pureza suficiente para tornar viável seu estudo e posterior aplicação tecnológica. Assim foi com os materiais do grupo IV e, posteriormente, III-V e suas ligas, que hoje podem ser crescidos com pureza da ordem de 99.99999999%, ou mais (Haller e Goulding 1993). Muitos dos fenômenos que caracterizam a física do estado sólido foram descobertos e estudados em semicondutores, devido a sua versatilidade. Os materiais do grupo IV (principalmente o *Si*) tornaram-se fundamentais para aplicações tecnológicas na área de microeletrônica. As ligas semicondutoras compostas por materiais das colunas III e V da tabela periódica passaram a ter grande aplicação tecnológica por terem, em sua maioria, *gaps* de energia diretos da ordem do infra-vermelho. São, assim, a matéria prima de grande parte dos dispositivos ópticos, também eletrônicos e opto-eletrônicos feitos de semicondutores. Grande interesse também vêm apresentando os materiais compostos por elementos das colunas II-VI, sendo que apenas recentemente amostras de boa qualidade destes materiais foram obtidas. Pelo fato de terem *gap* direto de energia da ordem da luz visível (verde e

azul) seu estudo tem atraído grande interesse devido a sua aplicação em áreas tecnológicas ligadas à aplicações ópticas, telecomunicações e armazenamento de dados, entre outras. Entretanto, por causa de sua grande ionicidade, o crescimento desses materiais é difícil.

Duas descobertas tiveram enorme repercussão na pesquisa e aplicação tecnológica dos semicondutores: a de fabricação de heteroestruturas semicondutoras (Esaki e Tsu 1969) e a dopagem modulada destas heteroestruturas (Störmer *et al* 1979). A primeira representa o crescimento epitaxial controlado de diferentes cristais, para formar estruturas compostas por diferentes materiais. Com isso os pesquisadores passaram a ter a seu dispor uma importante ferramenta que lhes permitiu combinar controladamente diferentes elementos com o objetivo de se obter um novo material, com propriedades inteiramente novas e predizíveis. Graças à dopagem modulada dos semicondutores é possível se controlar a densidade de um gás bidimensional de portadores sem a interferência dos estados de superfície e, portanto, estudar as propriedades eletrônicas desejadas. Aliando-se a dopagem modulada ao crescimento de heteroestruturas é possível termos gases de portadores, elétrons e/ou buracos, bidimensionais e unidimensionais, que permite estudar as novas propriedades dos sistemas de baixa dimensionalidade e usá-las, como já vem sendo feito, conforme nosso interesse nas áreas de pesquisa básica e aplicação tecnológica. Técnicas litográficas e de *etching* químico são usadas, conjuntamente com as mencionadas acima, para crescer nanoestruturas de formas e tamanhos variados.

Dentro desse cenário, o silício desempenhou um papel importante, tornando-se o semicondutor cujas propriedades são as mais bem conhecidas. Graças à combinação óxido-semicondutor, o silício é o principal material para a indústria de microeletrônica e nele se baseia a tecnologia dos circuitos integrados. Ainda assim, a pesquisa básica ligada a esse material foi esquecida durante algum tempo, pelo fato de se acreditar não haver novas propriedades de interesse ligadas ao silício, que pudessem ter impacto no desenvolvimento de novas tecnologias. Contudo, recentemente, devido ao desenvolvimento das técnicas de epitaxia, foi possível crescer heteroestruturas e ligas de excelente qualidade que uniam os dois semicondutores de maior importância: silício e germânio. Antes disso, a grande diferença entre seus parâmetros de rede, aproximadamente 4%, inviabilizava tal projeto,

devido a grande tensão que surge quando esses materiais são justapostos para formar uma junção. Com o avanço das pesquisas envolvendo heteroestruturas de *Si* e *Ge*, entretanto, o que era uma dificuldade tornou-se uma ferramenta importante e a tensão entre os materiais passou a ser usada como um grau de liberdade a mais para se obter novas propriedades de tais materiais.

Do ponto de vista das propriedades eletrônicas, quando comparadas a interfaces do tipo óxido-semicondutor, nas quais se baseia a tecnologia MOS (*metal-óxido-semicondutor*), as interfaces $Si_{1-x}Ge_x/Si$ apresentam qualidades bastante superiores, pois são o resultado de um crescimento epitaxial muito bem controlado. O impacto das junções $SiGe/Si$ é comparável ao das junções semicondutor-semicondutor em $GaAs/AlGaAs$, pois ambas estão livres da presença de estados de superfície. No entanto, as junções óxido-semicondutor e metal-semicondutor ainda dominam o mercado tecnológico. A pequena quantidade de centros espalhadores faz com que a mobilidade dos portadores de sistemas bidimensionais, gerados por este tipo de interface, seja bastante alta. Além disso, os dispositivos baseados na liga $SiGe$ são totalmente compatíveis com a tecnologia de micro-integração existente. Do ponto de vista das propriedades ópticas, a tensão pode ser usada como um meio para se definir a energia do *gap* e a descontinuidade das bandas entre os materiais (*band offset*). Desse modo, alguns dispositivos ópticos de *Ge* foram criados (Luryi *et al* 1984, Katalsky *et al* 1985). O crescimento de super-redes de Si/SiO_2 produziu amostras capazes de luminescer e que são hoje uma promessa para o projeto de integração completa entre óptica e eletrônica nos dispositivos semicondutores (Lockwood *et al* 1996).

Neste trabalho enfocamos algumas das propriedades dos estados de valência de heteroestruturas formadas pela liga $Si_{1-x}Ge_x$ crescida em *Si*. Uma importante característica desses materiais é o fato de que a descontinuidade das bandas confina de maneira eficiente apenas os buracos, tornando importante o conhecimento de suas propriedades. Mais precisamente, devido aos efeitos da tensão, heteroestruturas desse tipo podem apresentar um alinhamento de bandas do tipo I ou II, dependendo de como as camadas estão tensionadas (People 1984).

Nos semicondutores cujo topo da banda de valência ocorre no ponto Γ da zona de Brillouin, a degenerescência das bandas e a sua não parabolicidade torna a descrição desses estados uma tarefa difícil, quando comparada ao caso dos elétrons. Na década de 50, Luttinger e Kohn (1955) desenvolveram um Hamiltoniano capaz de tratar de maneira relativamente simples os estados de valência de semicondutores que apresentam tais características. A partir de um Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ eles obtiveram, por teoria de grupos, uma expressão que descreve até segunda ordem em \vec{k} as bandas de valência Γ_4 , levando-se em conta a presença das bandas superiores. Este Hamiltoniano é geralmente escrito na forma de uma matriz 4×4 e leva o nome de Hamiltoniano de Luttinger-Kohn. Para esses estados, considerando-se em conta o acoplamento spin-órbita, o spin deixa de ser um bom número quântico e é substituído pelo momento angular $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Os estados descritos pelos números quânticos $|J, m_j\rangle = |\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$ são conhecidos como buracos pesados (*HH*, *heavy holes*) e aqueles descritos por $|J, m_j\rangle = |\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ como buracos leves (*LH*, *light holes*). Os estados $|J, m_j\rangle = |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ são chamados buracos da banda *split-off* e têm seu máximo de energia abaixo do ponto Γ_4 , devido à interação spin-órbita. Os últimos não são explicitamente incluídos no Hamiltoniano de Luttinger-Kohn quando na forma de uma matriz 4×4 .

Em cristais de simetria cúbica, as bandas valência *HH* e *LH* são 4 vezes degeneradas em $\vec{k} = 0$. Parte dessa degenerescência se deve à simetria da rede cristalina e parte às duas projeções de m_j para cada estado. No caso em que a simetria cúbica é quebrada, por exemplo, por causa da tensão ou confinamento, a degenerescência devida a simetria da rede deixa de existir e ocorre uma separação entre as bandas *HH* e *LH*. Esse efeito aumenta a não parabolicidade das bandas.

Em razão da dificuldade em se tratar a banda de valência, poucos trabalhos, teóricos ou experimentais, enfocam esse tema. No caso de cristais tridimensionais, quando a simetria da rede é preservada, é possível obter uma solução analítica para o problema. Quando isso não se dá, uma solução numérica para o problema torna-se a única alternativa.

Esta tese está dividida em cinco capítulos e neles descrevemos o que foi obtido no estudo das propriedades eletrônicas dos estados de valência de sistemas bidimensionais

(2D) e zero-dimensionais (0D) de $SiGe/Si$. O primeiro capítulo foi dedicado a uma apresentação do assunto e a uma breve descrição do que vem sendo feito na área. As referências que aparecem neste capítulo, bem como as que serão citadas ao longo desta tese devem, dar ao leitor uma informação mais completa e detalhada do tema. O segundo capítulo descreve um estudo feito sobre as propriedades de um sistema *quasi*-bidimensional formado por um poço quântico de $Si_{1-x}Ge_x$ crescido em substrato de Si dopado tipo p. Os efeitos causados por um campo magnético externo nas propriedades deste sistema foram considerados e comparados com medidas de magneto-transporte feitas em amostras de alta mobilidade. No terceiro capítulo enfocamos o Hamiltoniano de buracos interagentes e mostramos que o termo da interação Coulombiana entre buracos pode ser dividido em duas componentes: uma delas que atua simplesmente na distribuição de cargas do sistema, como ocorre na interação Coulombiana entre elétrons; a outra provoca uma mudança na paridade dos buracos e apresenta correspondências com o Hamiltoniano de elétrons correlacionados, confinados em duas camadas. Para ilustrar essa teoria consideramos um ponto quântico (*Quantum Dot*, QD) ¹ de simetria cilíndrica. Efeitos causados pela presença de um campo magnético externo também foram considerados e obtivemos comportamentos qualitativamente diferentes daqueles que são característicos dos elétrons, confinados pelo mesmo tipo de potencial. No quarto capítulo investigamos algumas das propriedades de 1 e 2 buracos confinados em QDs e sob influência do potencial atrativo de uma impureza aceitadora. A formação de estados hidrogenóides, com um (A^0) e dois buracos (A^+) ligados à impureza, foram estudados em função de parâmetros como confinamento e campo magnético. Por fim, no quinto capítulo, fizemos um resumo e analisamos, de forma geral, o que se obteve desse estudo. Dois apêndices descrevem de forma detalhada expressões matemáticas e aspectos específicos considerados.

¹Ao longo deste trabalho usaremos a sigla QD quando nos referirmos a pontos quânticos (PQ), porque esta sigla pode causar confusão com poços quânticos.

Capítulo 2

Estrutura Eletrônica de Buracos em Poços Quânticos de $Si_{1-x}Ge_x/Si$ dopados tipo-p na presença de um Campo Magnético

2.1 Introdução

O crescimento de amostras de $Si_{1-x}Ge_x/Si$ de alta qualidade renovou o interesse pelo estudo de nanoestruturas baseadas nesses materiais (Zaslavsky *et al* 1995, Cheng *et al* 1993b) . Interfaces de boa qualidade entre Si e Ge , quando comparadas as de heteroestruturas com base em interfaces óxido-semicondutor, foram responsáveis por amostras de mobilidade extremamente altas (Arafa *et al* 1996, Xie *et al* 1993, Coleridge *et al*). Além disso, o acoplamento entre sub-bandas e efeitos de tensão, ambos sujeitos à concentração de Ge presente na amostra, acrescentam mais liberdade na busca por materiais com as propriedades eletrônicas desejadas (People 1984, Apetz *et al* 1995). No caso de poços quânticos de $SiGe$, os elétrons estão apenas fracamente confinados (Houghton *et al* 1995) e somente os buracos, na banda de valência, apresentam confinamento significativo. A compreensão da física desses materiais, portanto, requer o conhecimento das propriedades de um sistema de muitos buracos interagentes, tarefa que é bastante dificultada por causa da descrição dos buracos em termos do Hamiltoniano de Luttinger-Kohn (Luttinger e Kohn 1955, Luttinger 1956).

O acoplamento das sub-bandas leva a uma dispersão não linear dos níveis de Lan-

dan (NL) dos buracos, em função do campo magnético, e também a processos de espalhamentos de buracos que mudam sua paridade (Rego *et al* 1996). Em particular, o acoplamento entre sub-bandas é responsável pela separação dos níveis de Landau de paridades opostas, mesmo com a ausência do termo Zeeman no hamiltoniano. As propriedades eletrônicas de gases de buracos têm sido calculadas em vários graus de sofisticação (Schmit 1994, Wong *et al* 1995) e comparadas com experimentos de ressonância ciclotrônica (Wong *et al* 1995, Cheng *et al* 1993b) e absorção interbandas (Fromherz *et al* 1994). Pelo fato de acoplar predominantemente o movimento do centro de massa, os experimentos de ressonância ciclotrônica não são sensíveis aos efeitos de interação buraco-buraco. Medidas de absorção interbandas nos informam sobre a densidade conjunta de estados de valência, modificada pela depolarização e efeitos *excitônicos*. Por outro lado, medidas de magneto-transporte permitem a observação direta dos *gaps* de energia entre NL. Tais *gaps*, correspondem a fatores de preenchimento inteiros e são, essencialmente, uma manifestação das propriedades de uma partícula.

Neste capítulo apresentamos resultados da estrutura de energia de buracos em poços quânticos de $Si_{1-x}Ge_x/Si$, obtidos numericamente por meio de cálculos auto-consistentes. Os resultados teóricos são comparados com dados experimentais obtidos por meio de medidas de magneto-transporte feitas em amostras de poços de $SiGe/Si$ de alta mobilidade (Coleridge *et al*).

2.2 Teoria

Nesta seção descrevemos a teoria, os conceitos e as características do modelo físico usado no cálculo das propriedades da banda de valência de poços de $Si_{1-x}Ge_x/Si$.

Os sistemas estudados são amostras que apresentam dopagem modulada do tipo-p. Os aceitadores são depositados na região da barreira a uma certa distância, conhecida como espaçador, da interface. Dois sistemas são considerados: um deles com dopagem simétrica, a qual preserva a simetria de inversão em relação ao centro do poço; o outro com dopagem em apenas um dos lados do poço, o que provoca a quebra da simetria de

inversão.

2.2.a Cálculo Auto-consistente dos Estados de Valência para $B = 0$

Para um sistema que apresenta simetria de translação no plano do poço, representado pela coordenada $\vec{\rho}$, o vetor de onda \vec{k}_{\parallel} é um bom número quântico. Em poços simétricos os estados podem, ainda, ser classificados em termos de sua paridade, σ (Broido e Sham 1985). Para uma dada paridade e vetor de onda, a função de onda dos buracos Ψ é expandida em termos das funções de base $|J, m_j\rangle$, que representam o momento angular das funções de Bloch

$$\Psi^{\sigma, \vec{k}_{\parallel}}(\vec{\rho}, z) = e^{i\vec{k}_{\parallel}\vec{\rho}} \sum_{J, m_j} \chi_{k_{\parallel}}^{\sigma, m, m_j}(z) |J, m_j\rangle, \quad (2.1)$$

onde $\chi_{k_{\parallel}}^{\sigma, J, m_j}(z)$ são funções envelope que devem ser determinadas. Essas representam os buracos pesados ($J, m_j = \frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}$), os buracos leves ($J, m_j = \frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$) e os estados da banda de buracos *split-off* ($J, m_j = \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}$).

As funções $\chi_{k_{\parallel}}^{\sigma, J, m_j}(z)$ satisfazem um conjunto de equações diferenciais acopladas, descritas pelo Hamiltoniano de Luttinger-Kohn, incluindo-se as bandas *split-off*:

$$H_{LK} = \begin{pmatrix} P_+ & R & -S & 0 & \sqrt{2}R & -S/\sqrt{2} \\ R^\dagger & P_- & 0 & S & \sqrt{2}Q & \sqrt{3/2}S^\dagger \\ -S^\dagger & 0 & P_- & R & \sqrt{3/2}S & -\sqrt{2}Q \\ 0 & S^\dagger & R^\dagger & P_+ & -S^\dagger/\sqrt{2} & -\sqrt{2}R^\dagger \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{2}Q & \sqrt{3/2}S^\dagger & -S/\sqrt{2} & P^{so} + \Delta & 0 \\ -S^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{3/2}S & -\sqrt{2}Q & -\sqrt{2}R & 0 & P^{so} + \Delta \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Os elementos de matriz do Hamiltoniano (2.2) são operadores ($k_z \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial z}$) escritos na seguinte forma

$$P_+ = \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 + (\gamma_1 + \gamma_2)k_{\parallel}^2] + V_c(z) + V_{sc}(z) \quad (2.3)$$

$$P_- = \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 + (\gamma_1 - \gamma_2)k_{\parallel}^2] + V_c(z) + V_{sc}(z) \quad (2.4)$$

$$P^{so} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_{\parallel}^2 + k_z^2) + V_c(z) + V_{sc}(z) \quad (2.5)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} (-\sqrt{3}) \gamma_{23} k_-^2 \quad (2.6)$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_0} (2\sqrt{3}) \gamma_3 k_- k_z \quad (2.7)$$

$$Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (k_{\parallel}^2 - 2k_z^2) \quad (2.8)$$

onde $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$ e Δ é o deslocamento da banda de buracos *split-off* causado pela interação spin-órbita (Kane 1966). As massas efetivas na direção z (m_z) e no plano (m_{ρ}), na aproximação diagonal, são definidas como $m_z = 1/(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)$ e $m_{\rho} = 1/(\gamma_1 \pm \gamma_2)$, para HH (sinal superior) e LH (sinal inferior). A aproximação axial, $\gamma_2 = \gamma_3 \rightarrow \gamma_{23} = (\gamma_2 + \gamma_3)/2$ é usada na Eq. (2.6). O acoplamento entre as bandas HH , LH e SO é determinado pelos operadores R , S e Q . O termo diagonal $V_c(z)$ é o potencial de confinamento e $V_{sc}(z)$ é o potencial de Hartree auto-consistente, que representa a interação Coulombiana direta dos buracos entre si e com os aceitadores ionizados na barreira. $V_{sc}(z)$ é obtido auto-consistentemente pela Eq. de Poisson (2.12), mais a frente.

Para determinarmos as funções envelope $\chi_{k_{\parallel}}^{\sigma,J,m_j}(z)$ em todo o espaço recíproco \vec{k}_{\parallel} , fazemos uma expansão em termos das soluções $\chi_{k_{\parallel}=0}^{s,\sigma,J,m_j}(z)$ da aproximação diagonal, ou seja, $\chi_{k_{\parallel}}^{\sigma,J,m_j}(z) = \sum_s A^{s,\sigma,J,m_j}(k_{\parallel}) \chi_{k_{\parallel}=0}^{s,\sigma,J,m_j}(z)$.

As funções de onda correspondentes à $k_{\parallel} = 0$ para os buracos pesados, buracos leves e buracos da banda *split-off* são soluções das seguintes equações:

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + eV_{sc}(z) \right\} \chi_s^{HH}(z) &= E_s^{HH} \chi_s^{HH}(z) \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + eV_{sc}(z) \right\} \chi_s^{LH}(z) &= E_s^{LH} \chi_s^{LH}(z) \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + eV_{sc}(z) \right\} \chi_s^{SO}(z) &= E_s^{SO} \chi_s^{SO}(z) \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde s é o índice da sub-banda. As equações (2.9) não levam em conta o termo não diagonal em k_z^2 , referente ao operador Q em (2.2), que acopla os buracos leves aos buracos da banda *split-off* mesmo em $k_{\parallel} = 0$.

Cada uma das Eqs. (2.9) é discretizada em passos de comprimento δ_z , e o problema é

transformado na diagonalização de hamiltonianos para HH , LH e SO , como no exemplo abaixo:

$$-(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)[\chi_{j-1}^\alpha - 2\chi_j^\alpha + \chi_{j+1}^\alpha] + V_c^j \chi_j^\alpha + eV_{sc}^j \chi_j^\alpha = E^\alpha \chi_j^\alpha, \quad (2.10)$$

onde j é o índice de um ponto na malha, α é um autoestado e todas as energias são medidas em $\frac{\hbar^2}{2m_0\delta_z^2}$. As funções envelope são definidas ao longo de um comprimento L , muito maior que o comprimento de interesse, isto é, as regiões dopadas e as dimensões do poço quântico. As funções de onda são definidas de forma a se anularem nos extremos do sistema (em $z = 0$ e $z = L$). Neste trabalho não foi considerada a diferença de massas efetivas entre o poço e a barreira. Embora esse seja um procedimento comumente aplicado, não é rigorosamente justificado. Ainda, pelo fato de estarmos descrevendo funções de onda altamente concentradas dentro do poço, os diferentes parâmetros de Luttinger da barreira não devem ter grande influência nos estados dos buracos dentro do poço.

O Hamiltoniano H_{LK} projetado na base (2.1) é uma matriz e sua diagonalização determina os coeficientes $A_\lambda^{s,\sigma,J,m_j}(k_\parallel)$ para um dado autovalor λ . A precisão das soluções geradas por esse método foi verificada analisando-se a convergência dos autovalores quando o tamanho da base é aumentado. O uso de 8 sub-bandas mostrou-se suficiente para satisfazer tais condições. Para amostras dopadas em ambos os lados do poço, a simetria de inversão na direção z faz com que as soluções com paridades opostas ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) sejam degeneradas. Porém, quando esta simetria é quebrada pelo campo elétrico gerado pela dopagem em apenas um dos lados da amostra, as duas paridades se acoplam dando origem a duas sub-bandas distintas, com massas efetivas diferentes. Nesse caso σ designa estas novas soluções, que são resultantes do acoplamento das paridades. Uma vez determinados os coeficientes $A_\lambda^{s,\sigma,J,m_j}(k_\parallel)$, a densidade de carga dos buracos ($\rho(z)$) dentro do poço é obtida pela expressão

$$\rho(z) = \sum_{\lambda}^{ocupados} \sum_{\sigma, k_\parallel} |\Psi_\lambda^{\sigma, k_\parallel}(\vec{r})|^2. \quad (2.11)$$

O potencial auto-consistente, por sua vez, é determinado pela densidade total de cargas ($\rho(z)$) e aceitadores ionizados ($\rho_{acc}(z)$) da seguinte forma

$$V_{sc}(z) = \frac{4\pi e}{\epsilon_0} \int_0^z dz' \int_0^{z'} dz'' [\rho(z'') - \rho_{acc}(z'')] . \quad (2.12)$$

Doadores residuais não foram levados em conta, devido a alta qualidade das amostras. Portanto, a densidade planar de cargas pode ser obtida da seguinte forma, em função da coordenada z

$$\rho(z) = e \left\{ \sum_{\lambda, J, m_j, \sigma}^{ocupados} \frac{1}{2\pi} \int_{k_1}^{k_2} \left(k_{\parallel} dk_{\parallel} \left| \sum_s A_{\lambda}^{s, \sigma, J, m_j}(k_{\parallel}) \chi_s^{\sigma, J, m_j}(k_{\parallel} = 0; z) \right|^2 \right) - \rho_{acc}(z) \right\} . \quad (2.13)$$

Para um poço simétrico a soma sobre σ resulta em um fator multiplicativo 2, devido a degenerescência desses estados. Os parâmetros k_1 e k_2 são determinados em função do nível de Fermi do sistema.

2.2.b Efeitos da Tensão

Os efeitos da tensão, causados pelo descasamento dos parâmetros de rede entre os materiais que formam o poço e a barreira, são tratados de acordo com o formalismo de Bir e Pikus (Bir e Pikus 1974, Pearsall 1991). A tensão biaxial no plano do poço pode ser dividida em duas componentes: uma tensão hidrostática (H), tridimensional, menos uma tensão uniaxial aplicada perpendicularmente ao plano do poço. Essas duas componentes são descritas pelas expressões

$$\begin{aligned} \Delta_H &= -a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \\ \Delta_{001} &= \frac{b}{2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}), \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = (a_0 - a)/a$ e $\epsilon_{zz} = -2(C_{12}/C_{11})\epsilon_{xx}$, com a_0 e a representando as constantes de rede do substrato e da camada tensionada, respectivamente. Os parâmetros a_v e b são os potenciais de deformação dos materiais (Madelung 1987). Devido ao fato de que $a_{Si} < a_{Ge}$, uma camada de $Si_{1-x}Ge_x$ crescida num substrato de Si é submetida a uma tensão compressiva.

O termo hidrostático é responsável pelo aumento do *gap* do material tensionado e, por estarmos interessados apenas na banda de valência, não terá influência em nossos resultados, uma vez que a maior parte da tensão hidrostática vai para a banda de condução (People 1984). O termo uniaxial, por outro lado, manifesta-se de duas formas em nossos resultados. Primeiramente, ele possui termos que estão presentes nos elementos diagonais do Hamiltoniano de Luttinger-Kohn, referentes apenas aos estados HH e LH . Este termo contribue com sinais opostos para as energias de HH e LH , causando uma separação rígida entre os fundos dessas bandas, que equivale à $2\Delta_{001}$. O segundo efeito é o acoplamento de buracos leves e buracos da banda *split-off*, que ocorre mesmo a $k_{\parallel} = 0$.

2.2.c Densidade de Estados no Plano do Poço

A densidade de estados dos buracos difere daquela apresentada por elétrons devido a não parabolicidade de sua dispersão. A densidade de estados de partículas com dispersão parabólica, em sistemas *quasi*-bidimensionais, é representada por degraus planos (Butcher 1993). A densidade de estados dos buracos pode apresentar grandes variações em relação a esse padrão (Altarelli *et al* 1985).

O formalismo utilizado no cálculo da densidade de estados é brevemente descrito a seguir. O número de estados com energia entre E e $E + dE$, por unidade de área do espaço recíproco bidimensional, é

$$n(E)dE = \frac{1}{4\pi^2} \int dS_{\vec{k}_{\parallel}} \quad (2.15)$$

O termo $\frac{1}{4\pi^2}$ é o número de estados por unidade de área no plano (k_x, k_y) . A expressão acima também pode ser escrita em termos da energia como

$$n(E)dE = \frac{1}{4\pi^2} \int \frac{dE}{|\nabla_{\vec{k}_{\parallel}} E(\vec{k}_{\parallel})|} \vec{k}_{\parallel} d\phi. \quad (2.16)$$

Em nosso modelo consideramos a aproximação axial para descrever a dispersão dos buracos no plano do poço, portanto a integração sobre ϕ fornece

$$n(E)dE = \frac{1}{4\pi^2} 2\pi \frac{dE}{|\nabla_{\vec{k}_{\parallel}} E(\vec{k}_{\parallel})|} k \quad (2.17)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{dE}{\frac{1}{k} \frac{dE(k)}{dk}} \quad (2.18)$$

e a densidade de estados, sem que seja levada em conta a degenerescência devido ao spin (ou paridade), é

$$n(E) = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{k} \frac{dE(k)}{dk} \right]^{-1} . \quad (2.19)$$

2.2.d Massa Efetiva dos Buracos

A massa efetiva é determinada de acordo com o experimento realizado, conseqüentemente há várias maneiras de se obtê-la. Aqui apresentamos o formalismo que calcula a massa efetiva a campo nulo. Consideremos que seja interessante escrever a dispersão dos buracos da mesma maneira que fazemos para as partículas livres. Nesse caso massa efetiva média irá incorporar os efeitos causados pela não-parabolicidade das bandas de valência.

Sendo as bandas as parabólicas, temos:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \implies n(E) = \frac{m^*}{2\pi \hbar^2} , \quad (2.20)$$

podendo expressar a densidade de estados em termos da massa efetiva média como

$$m^* = 2\pi \hbar^2 n(E) . \quad (2.21)$$

Introduzindo a expressão (2.19) em (2.21) obtemos a densidade de estados em termos do vetor de onda $k_{||}$, para uma banda não parabólica

$$\frac{m^*}{m_0} = \frac{\hbar^2}{m_0} \left[\frac{1}{k_{||}} \frac{dE(k_{||})}{dk_{||}} \right]^{-1} . \quad (2.22)$$

Uma expressão equivalente é

$$\frac{m^*}{m_0} = \frac{\hbar^2}{2\pi m_0} \int \delta(E - E(\vec{k}_{||})) d\vec{k}_{||} . \quad (2.23)$$

2.2.e Campos Magnéticos Finitos

Na presença de um campo magnético, externo aplicado ortogonalmente ao plano do poço, o Hamiltoniano de Luttinger-Kohn é escrito substituindo-se o vetor de onda $\vec{k}_{||}$,

que deixa de ser um bom número quântico nessas condições, pelo momento generalizado $\vec{\Pi} = (\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A})$. Escrevemos o potencial vetor no calibre simétrico $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$. Assim torna-se conveniente introduzir-se os operadores de levantamento (a^+) e abaixamento (a) da ordem do oscilador harmônico. Fazemos isto em termos das variáveis canônicas $p = l_B \Pi_x$ e $q = l_B \Pi_y$, onde l_B representa o comprimento magnético para um dado valor de B ($l_B = [\frac{\hbar c}{eB}]^{1/2}$),

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(p + iq) \quad (2.24)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(p - iq) . \quad (2.25)$$

Segundo esse formalismo, os operadores do Hamiltoniano H_{LK} ficam escritos da seguinte forma

$$P_+ = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 + \frac{2}{l_B^2}(\gamma_1 + \gamma_2) \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \right\} + V_c(z) + V_{sc}(z) \quad (2.26)$$

$$P_- = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 + \frac{2}{l_B^2}(\gamma_1 - \gamma_2) \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \right\} + V_c(z) + V_{sc}(z) \quad (2.27)$$

$$P^{so} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \left\{ k_z^2 + \frac{2}{l_B^2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \right\} + V_c(z) + V_{sc}(z) \quad (2.28)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} (-\sqrt{3}) \left(\frac{\gamma_3 + \gamma_2}{2} \right) a^2 \quad (2.29)$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_0} (2\sqrt{3}) \gamma_3 k_z \frac{\sqrt{2}}{l_B} a \quad (2.30)$$

$$Q = \frac{\hbar}{2m_0} \gamma_2 \left\{ \frac{2}{l_B^2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) - 2k_z^2 \right\} . \quad (2.31)$$

Na presença de um campo magnético as funções de onda dos buracos são expressas em termos de funções de onda de osciladores harmônicos $u_l(\rho)$. As soluções do Hamiltoniano (2.2), com seus operadores dados pelas expressões acima, são espinores de 6 componentes que contém, em geral, contribuições das bandas HH , LH e SO . Para os números

quânticos n e paridade $\sigma = \uparrow$ temos

$$\Psi^{\uparrow, n} = \begin{pmatrix} \sum_{s'=\text{par}} C_{3/2}^{n, \uparrow, s'} \chi_{s'}^{HH}(z) & u_n & |+\frac{3}{2}\rangle \\ \sum_{s'=\text{par}} C_{-1/2}^{n, \uparrow, s'} \chi_{s'}^{LH}(z) & u_{n+2} & |-\frac{1}{2}\rangle \\ \sum_{s''=\text{impar}} C_{1/2}^{n, \uparrow, s''} \chi_{s''}^{LH}(z) & u_{n+1} & |+\frac{1}{2}\rangle \\ \sum_{s''=\text{impar}} C_{-3/2}^{n, \uparrow, s''} \chi_{s''}^{HH}(z) & u_{n+3} & |-\frac{3}{2}\rangle \\ \sum_{s'=\text{par}} C_{-1/2}^{n, \uparrow, s'} \chi_{s'}^{SO}(z) & u_{n+2} & |-\frac{1}{2}\rangle \\ \sum_{s''=\text{impar}} C_{1/2}^{n, \uparrow, s''} \chi_{s''}^{SO}(z) & u_{n+1} & |+\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

e para a paridade $\sigma = \downarrow$

$$\Psi^{\downarrow, n} = \begin{pmatrix} \sum_{s''=\text{impar}} C_{3/2}^{n, \downarrow, s''} \chi_{s''}^{HH}(z) & u_n & |+\frac{3}{2}\rangle \\ \sum_{s''=\text{impar}} C_{-1/2}^{n, \downarrow, s''} \chi_{s''}^{LH}(z) & u_{n+2} & |-\frac{1}{2}\rangle \\ \sum_{s'=\text{par}} C_{1/2}^{n, \downarrow, s'} \chi_{s'}^{LH}(z) & u_{n+1} & |+\frac{1}{2}\rangle \\ \sum_{s'=\text{par}} C_{-3/2}^{n, \downarrow, s'} \chi_{s'}^{HH}(z) & u_{n+3} & |-\frac{3}{2}\rangle \\ \sum_{s''=\text{impar}} C_{-1/2}^{n, \downarrow, s''} \chi_{s''}^{SO}(z) & u_{n+2} & |-\frac{1}{2}\rangle \\ \sum_{s'=\text{par}} C_{1/2}^{n, \downarrow, s'} \chi_{s'}^{SO}(z) & u_{n+1} & |+\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Existe uma diferença qualitativa entre os estados Ψ^{\uparrow} e Ψ^{\downarrow} de menor energia. O estado de mais baixa energia corresponde a um buraco do tipo HH com uma função envelope par em relação à coordenada z . Para $\sigma = \uparrow$ isto significa $n = 0$ e $m_j = \frac{3}{2}$. O estado resultante é o espinor $\Psi^{\uparrow, n=0}$, que tem projeção não nula em todos os estados de base $|m_j\rangle$. No caso em que $\sigma = \downarrow$, o estado de mais baixa energia é aquele com $n = -3$ e $m_j = -\frac{3}{2}$, que resulta em $\Psi^{\downarrow, n=-3} = \cos(\pi z/\omega) u_0 |m_j = -\frac{3}{2}\rangle$. A projeção deste estado nas outras funções de base deve ser nula, pois não há sentido físico em u_l com $l < 0$. Este NL é completamente desacoplado e, portanto, chamado de nível de Landau anômalo. O segundo estado de mais baixa energia com $\sigma = \uparrow$ é $\Psi^{\uparrow, n=1}$, também composto por todos os estados de base. Para $\sigma = \downarrow$, o segundo estado de mais baixa energia corresponde a $n = -2$. Isto faz com que as componentes do espinor com números quânticos $l = n, n+1$ tenham coeficientes $C_{m_j}^{n, \downarrow, s}$ nulos. Embora o estado $\Psi^{\downarrow, -2}$ não seja completamente desacoplado,

também o chamaremos de anômalo. Da mesma forma para o estado $\Psi^{1,-1}$. Os estados $\Psi^{1,n \geq 0}$ passam a ter projeção em toda a base $|m_j\rangle$ e deixam de ser anômalos.

Em princípio, o potencial auto-consistente depende do campo magnético, devido às oscilações do nível de Fermi. Tal efeito causa a redistribuição dos portadores entre os níveis de Landau (Hawrylak *et al* 1993). Entretanto, numa primeira aproximação, nós desprezamos o efeito do campo magnético no potencial auto-consistente e o calculamos apenas para $B = 0$, assumindo o mesmo potencial auto-consistente $B \neq 0$.

2.2.f Massa Ciclotrônica

Para um caso geral, a massa ciclotrônica de um portador não é a mesma que sua massa efetiva média (calculada a $B = 0$), pois esta é uma propriedade de sua órbita e não de um estado eletrônico particular. Supondo que o portador não sofra espalhamentos durante o período que leva para completar a órbita ciclotrônica, o campo magnético vai afetar o seu comportamento da seguinte maneira:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e}{c\hbar} \vec{v} \times \vec{B} \quad (2.34)$$

e o portador completará a órbita em um tempo dado por

$$\frac{2\pi}{\omega_B} = \frac{c\hbar}{eB} \oint \frac{d\vec{k}}{v_{||}}, \quad (2.35)$$

onde A é a área compreendida pela órbita no plano perpendicular à direção do campo. Como consideramos uma simetria cilíndrica para a dispersão de energias no plano (k_x, k_y), a expressão acima pode ser simplificada para

$$m_B = \hbar^2 \left[\frac{1}{k_F} \frac{dE}{dk_F} \right]^{-1} \quad (2.36)$$

onde k_F é o vetor de onda de Fermi. Logo, neste modelo, a massa ciclotrônica e a massa efetiva coincidem.

2.3 Resultados e Discussão

Nesta seção descrevemos resultados relativos a duas amostras estudadas recentemente, são elas: **CVD121**, que apresenta dopagem modulada em apenas um dos lados do poço, e

CVD124, que apresenta dopagem modulada em ambos os lados do poço. Os parâmetros que as caracterizam estão na tabela 1:

Parâmetros das Amostras					
amostra	Ge	dopagem	espaçador	largura do poço	concentração
CVD121	12%	one side ($2.10^{18}cm^{-3}$)	200 Å	400 Å	$3.0 \times 10^{11}cm^{-2}$
CVD124	13%	two side ($1.10^{18}cm^{-3}$)	300 Å	200 Å	$3.4 \times 10^{11}cm^{-2}$

Para uma concentração de *Ge* no poço igual a 12% temos os seguintes parâmetros de Luttinger, conseguidos por interpolação linear entre *Si* e *Ge*: $\gamma_1 = 5.376$, $\gamma_2 = 0.807$ e $\gamma_3 = 1.955$ (Madelung 1987). Para a amostra **CVD121** o descasamento dos parâmetros de rede é de 0.45%, o que gera uma tensão compressiva que aumenta em $31meV$ a diferença de energia entre o fundo das bandas *LH* e *HH*. O deslocamento das bandas *split-off* devido a interação spin-órbita é $\Delta = 70meV$.

Os resultados obtidos por meio do cálculo auto-consistente a $B = 0$, referentes às amostras **CVD121** e **CVD124**, podem ser vistos nos gráficos da Figura 2.1. Em ambos os casos apenas o estado HH_1 está ocupado. Na amostra **CVD121** os portadores se concentram em uma das interfaces do poço, devido ao potencial atrativo gerado pelos aceitadores ionizados. Nesta amostra, o nível de Fermi a campo nulo está a aproximadamente $1meV$ abaixo da segunda sub-banda (HH_2). As primeiras sub-bandas correspondentes aos buracos leves e *split-off* têm energias $E_{LH_1} = 45.5meV$ e $E_{SO_1} = 82.7meV$.

No que se refere a amostra **CVD124**, dopada simetricamente, a densidade de cargas é maior no centro do poço e não há formação de duas populações de buracos independentes, como observado em alguns sistemas (Guldner *et al* 1993). Todavia, cálculos realizados para poços de $40nm$ de espessura, não apresentados nesta tese, revelaram a formação de duas populações de buracos independentes dentro do poço. A presença de dois gases de portadores independentes pode ser verificada comparando-se as concentrações medidas por meio de oscilações de Shubnikov-de Hass e Efeito Hall Quântico. A separação entre os fundos das bandas *HH* e *LH*, gerada pela tensão, é $33meV$ para esta amostra.

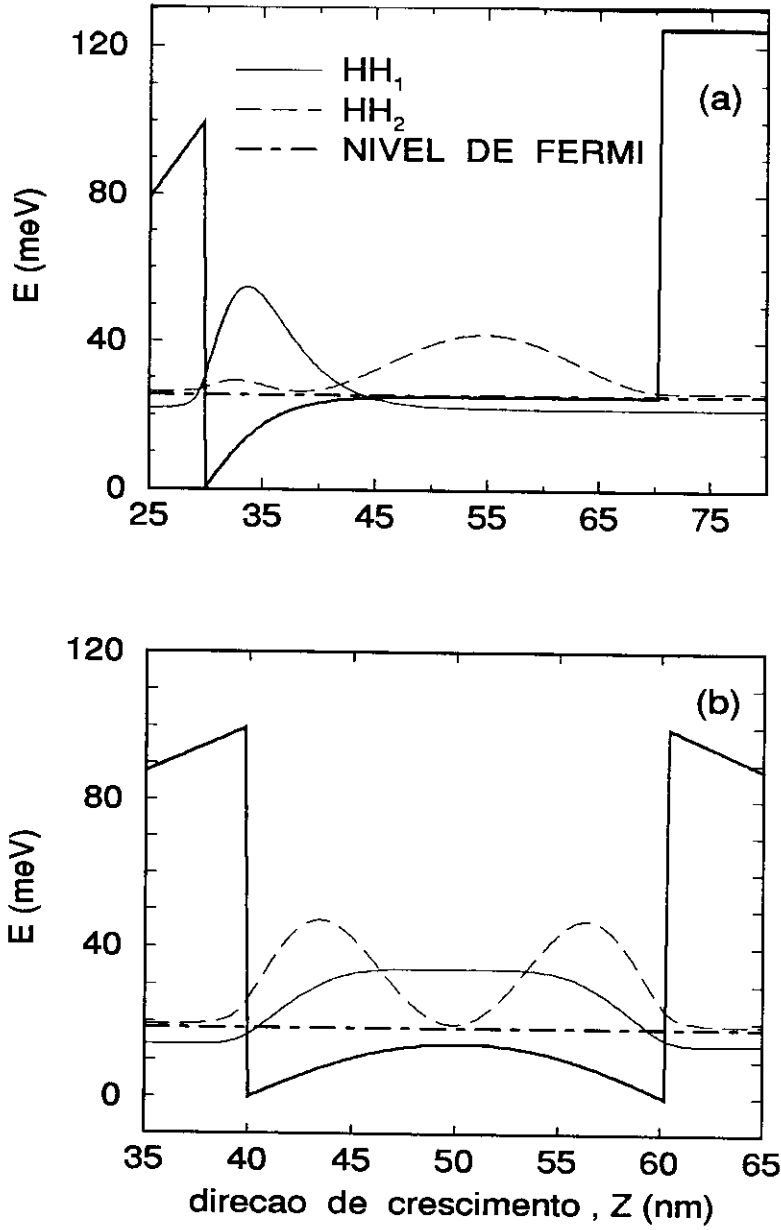


Figura 2.1: (a) Perfil de potencial do extremo da banda de valência, $V(z)$, para a amostra CVD121 e (b) para a amostra CVD124. As sub-bandas de mais baixa energia, o nível de Fermi, e as auto-funções dos estados de mais baixa energia estão representadas.

A Figura 2.2 apresenta a dispersão das sub bandas de mais baixa energia em função do vetor de onda k_{\parallel} . A região do espaço recíproco apresentada na Figura 2.2 equivale a aproximadamente 2% do comprimento total do espaço recíproco ($K = 2\pi/a$). Quanto a amostra **CVD121**, as bandas se separam a $k_{\parallel} \neq 0$. A linha tracejada representa o nível de Fermi do sistema. Nos gráficos ao lado direito da Fig. 2.2 temos as densidades de estados em função da energia, para as duas amostras. Os degraus são característicos de um sistema *quasi*-bidimensional. O primeiro patamar é relativamente plano, evidenciando o fato de que a primeira sub-banda (HH_1) está aproximadamente desacoplada das demais e tem uma dispersão quase parabólica para pequenos valores do vetor de onda k_{\parallel} . Os patamares seguintes mostram que o acoplamento entre sub-bandas aumenta para as sub-bandas de maior energia. Nestes gráficos a linha pontilhada também representa o nível de Fermi. A separação entre HH e LH , produzida pela tensão, diminui o acoplamento entre as sub-bandas de mais baixa energia dos buracos leves e pesados.

As massas efetivas calculadas a campo nulo para a amostra **CVD121**, referentes as sub-bandas HH_1 , são $m^* = 0.23m_0$ e $m^* = 0.21m_0$. Como mencionamos anteriormente, a forma como são obtidas, bem como os valores das massas efetivas de buracos nesses materiais, é um tema controverso. Esses valores dependem de parâmetros como concentração de Ge na liga (X_{Ge}), concentração de portadores (N_H) e largura do poço (ω). Alguns dos resultados experimentais encontrados na literatura são:

$$m^* = 0.4m_0 \text{ (} X_{Ge} = 13\%, N_H = 8.10^{11}cm^{-2}, \omega = 8nm, \text{ ressonância ciclotrônica) } \\ \text{(Cheng et al 1993a);}$$

$$m^* = 0.23m_0 \text{ (} X_{Ge} = 13\%, N_H = 2.210^{11}cm^{-2}, \text{ magneto-transporte) (Whall et al 1994);}$$

$$m^* = 0.24m_0 \text{ (} X_{Ge} = 10\%, N_H = 3.810^{11}cm^{-2}, \omega = 40nm, \text{ magneto-transporte) } \\ \text{(Dunford et al);}$$

$$m^* = 0.23m_0 \text{ (} X_{Ge} = 13\%, N_H = 5.10^{11}cm^{-2}, \text{ magneto-transporte) (Kasper 1975);}$$

$$m^* = 0.18m_0 \text{ (} X_{Ge} = 12\%, N_H = 3.710^{11}cm^{-2}, \omega = 40nm, \text{ ressonância ciclotrônica) } \\ \text{(Song et al 1995).}$$

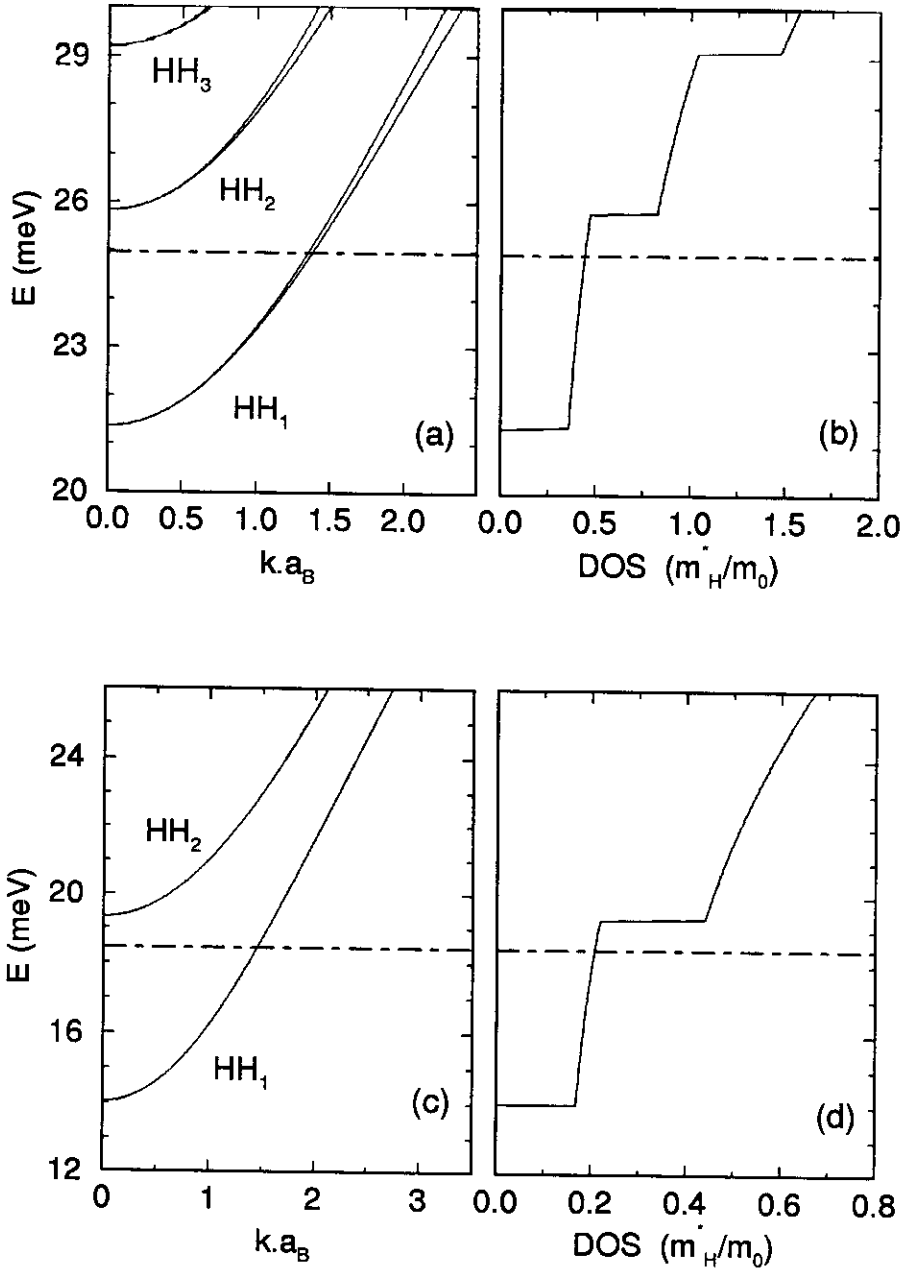


Figura 2.2: Dispersão de energia dos buracos: (a) para a amostra **CVD121** e (c) para a amostra **CVD124**, como função do vetor de onda $k_{||}$. A linha traço-ponto representa o nível de Fermi. As respectivas densidades de estados são apresentadas ao lado direito de cada figura.

Portanto, verificamos que o valor da massa efetiva obtido em nosso trabalho está em bom acordo com os resultados da literatura. A massa efetiva tornou-se uma característica importante para esses materiais, do ponto de vista tecnológico. Combinando-se ω e X_{GE} , com o objetivo de diminuir o acoplamento entre as bandas, é possível gerar buracos com massa bastante leve e, com isso, gases de buracos de alta mobilidade.

O efeito do campo magnético nos níveis de energia de buracos da amostra **CVD121**, desprezando-se o acoplamento Zeeman ($\kappa = 0$), é apresentado na Figura 2.3(a). A linha tracejada indica o nível de Fermi para $B \neq 0$. As oscilações do nível de Fermi correspondem aos fatores de preenchimento $\nu = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$. Em um sistema, no qual não houvesse acoplamento entre as sub-bandas, os estados de paridades opostas (ou spin, como ocorre com os elétrons) seriam degenerados e a Fig. 2.3(a) apresentaria apenas a metade do número de níveis de Landau. Assim o acoplamento entre as sub-bandas é responsável pela separação dos níveis de Landau de paridades opostas, mesmo desprezando-se a interação Zeeman.

Uma característica importante da banda de valência é o fato de que os estados com paridade $\sigma = \downarrow$ são fracamente acoplados (anômalos), enquanto que os estados com $\sigma = \uparrow$ estão fortemente acoplados e são uma mistura de todas as 6 componentes do espinor. A mistura de bandas provoca uma dispersão não linear dos níveis de Landau em função de B . Os números vistos na Fig. 2.3 representam o número quântico n , que descreve os espinores $\Psi^{\uparrow,n}$ e $\Psi^{\downarrow,n}$. Considerando, por exemplo, os estados $\Psi^{\uparrow,0}$, $\Psi^{\uparrow,1}$ e $\Psi^{\uparrow,2}$, observamos que todas as componentes do espinor contribuirão para o estado final Ψ , o que significa que cada um destes níveis de Landau é uma combinação de buracos pesados, buracos leves e buracos da banda *split-off*. Por outro lado, para $\sigma = \downarrow$, o estado $\Psi^{\downarrow,-3}$ corresponde a um estado totalmente desacoplado ($m_j = \frac{3}{2}$). $\Psi^{\downarrow,-2}$ é uma combinação de três componentes ($m_j = -\frac{3}{2}, m_j = -\frac{1}{2}$, *LH* e *SO*) e $\Psi^{\downarrow,-1}$ é uma combinação de cinco componentes. Em consequência os estados anômalos revelam uma dispersão quase linear em função do campo magnético, como pode ser visto na Fig. 2.3(a).

Consideremos agora a dispersão dos mesmos níveis de Landau, mas com paridades opostas: $(0 \uparrow, -3 \downarrow)$, $(1 \uparrow, -2 \downarrow)$ e $(2 \uparrow, -1 \downarrow)$. Lembrando que no plano do poço os

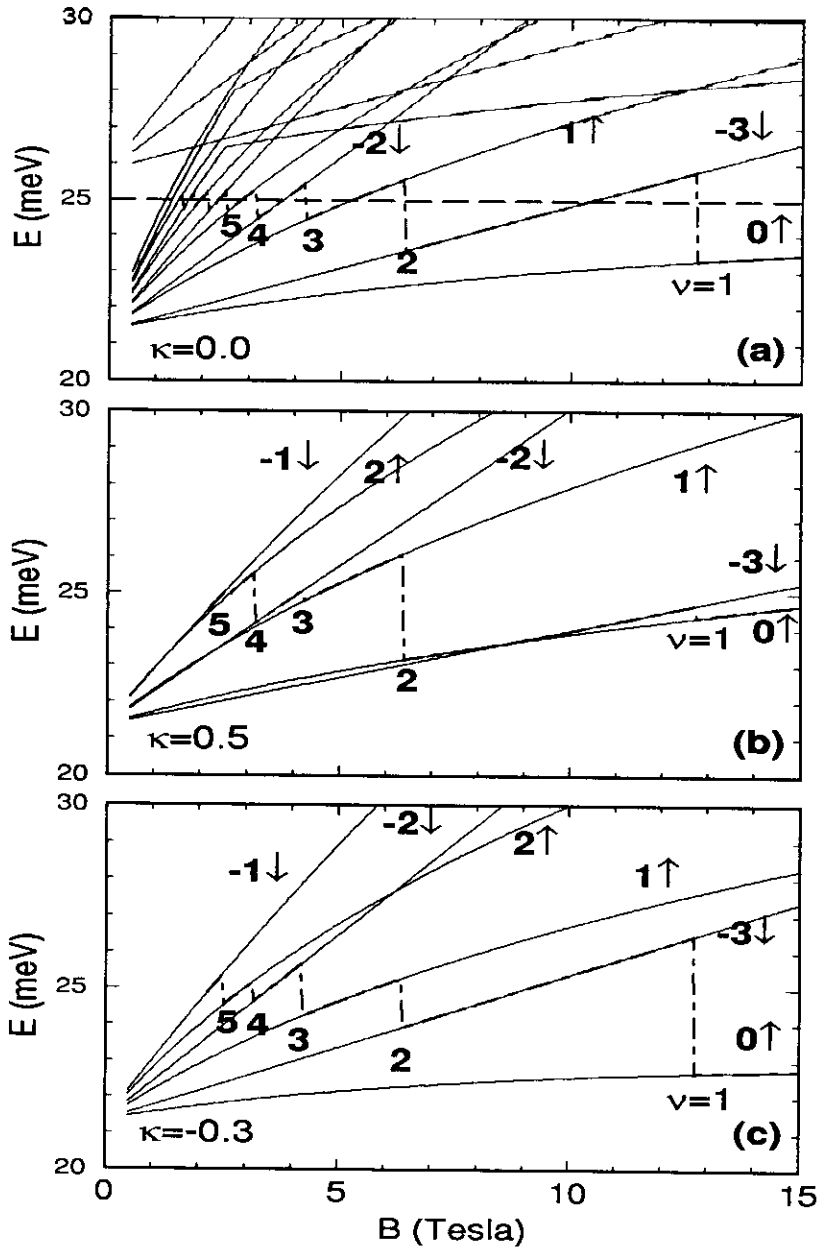


Figura 2.3: Dispersão de energia dos buracos em função do campo magnético para a amostra CVD121. Os fatores (a) $\kappa = 0$, (b) $\kappa = +0.5$ e (c) $\kappa = -0.3$ são considerados. A linha traço-ponto representa as oscilações do nível de Fermi a $B = 0$ e a linha tracejada plana (apenas em (a)) o nível de Fermi a $B = 0$, indicado apenas como uma referência. Em (b) e (c) apenas os três níveis de Landau de mais baixa energia estão representados. eletrônico efetivo.

buracos LH não acoplados têm massa mais pesada que os HH , $m_{3/2}^*(k=0) = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2} < m_{1/2}^*(k=0) = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2}$, concluímos que os estados anômalos devem ter sempre energia maior que seus correspondentes de paridade oposta, estes fortemente influenciados pelas demais sub-bandas.

A seguir incluímos a interação representada pelo termo Zeeman $\Delta E = m_j \kappa B$. Os valores de κ para Si e Ge puros são $\kappa_{Si} \approx -0.42$ e $\kappa_{Ge} \approx 3.4$ (Madelung 1987). Como o valor de κ não é conhecido para nossas amostras e deve, também, depender da concentração de buracos, consideramos diferentes possibilidades. Os 3 níveis de Landau de mais baixa energia, e ambas as paridades, estão representados na Fig. 2.3(b) para o caso em que $\kappa = 0.5$. Neste caso o termo Zeeman faz com que NL de paridades opostas aproximem-se uns dos outros, diminuindo os *gaps* de energia correspondentes a fatores de preenchimento (ν) ímpares e aumentando aqueles referentes aos pares. Quando grandes o suficiente, valores positivos para o parâmetro κ farão com que mesmos NL, de paridades opostas, se cruzem, como pode ser visto na Fig. 2.2(b) e nos cálculos para $GaAs$ ($\kappa = 1.2$) (Broido e Sham 1985) e trabalhos de Martin et al. (1990) para $Ga_{0.85}In_{0.15}Sb$ ($\kappa \approx 5.7$). Cruzamentos entre diferentes níveis de Landau também podem ocorrer, pois estados de paridade \uparrow possuem uma dispersão quase linear com B , enquanto que os estados de paridade \downarrow têm uma dispersão sublinear. As posições de tais cruzamentos vão depender do valor de κ e dos parâmetros da amostra.

Para κ negativo, níveis de Landau de paridades opostas separam-se conforme B aumenta, ver Fig. 2.3(c). Isso faz com que os *gaps* correspondentes a ν par diminuam e aqueles referentes a ν ímpar aumentem. Fig. 2.3(c) contém resultados relativos a $\kappa = -0.3$, aquele que melhor descreve os resultados experimentais.

A predominância de fatores de preenchimento ímpares sobre os pares, como vem sendo observada nas curvas de resistência Hall, em medidas de magneto-transporte, é uma característica comum de amostras das $SiGe$ com dopagem tipo-p (Dunford et al., Fang et al 1992, Kasper 1975, Apetz et al 1994, Nützel et al 1992). Normalmente, em medidas feitas na banda de valência, os vales das oscilações de Shubnikov-de Hass são detectáveis apenas para os fatores de preenchimento pares mais baixos ($\nu = 2$ ou 4), que

correspondem a grandes *gaps* de energia.

A Tabela II apresenta valores teóricos e experimentais da energia dos *gaps* entre NL, referentes a amostra **CVD121**, para diferentes fatores de preenchimento.

Energia dos <i>Gaps</i> da amostra CVD 121 (<i>meV</i>)					
ν	Exper.	$\kappa = 0.0$	$\kappa = -0.2$	$\kappa = -0.3$	$\kappa = -0.5$
1	5.3	2.48	3.34	3.76	4.62
2	2.3	1.98	1.55	1.34	0.91
3	1.5	0.98	1.26	1.41	1.70
4	-	0.83	0.62	0.51	0.29
5	0.8	0.55	0.72	0.80	0.97
7		0.35	0.47	0.54	0.66
9		0.23	0.32	0.37	0.46

A tabela III apresenta resultados teóricos e experimentais dos *gaps* obtidos para a amostra **CVD124** (Coleridge *et al*)

Energia dos <i>Gaps</i> da amostra CVD 124 (<i>meV</i>)					
ν	Exper.	$\kappa = 0.0$	$\kappa = -0.2$	$\kappa = -0.3$	$\kappa = -0.5$
1		2.39	3.36	3.53	3.53
2	2.6	2.75	2.27	2.03	1.54
3	2.0	1.03	1.35	1.52	1.85
4	0.7	1.17	0.92	0.80	0.56
5	0.9	0.58	0.77	0.87	1.06
7	0.6	0.36	0.50	0.57	0.70
9	0.4	0.24	0.35	0.40	0.51
11	0.4	0.14	0.23	0.28	0.36

Para $\kappa = -0.3$, a relação entre valores medidos e calculados para os diferentes fatores de preenchimento apresenta razoável acordo. Particularmente, a dominância dos fatores de preenchimento ímpares concorda com resultados experimentais obtidos para esse tipo

de material. Essa é uma forte indicação experimental de que o acoplamento das bandas contribui para aumentar a separação entre os níveis de Landau de paridades opostas, da forma como atua o efeito Zeeman. A discrepância entre valores teóricos e experimentais para baixos fatores de preenchimento ($\nu \leq 2$), acredita-se, é devida a efeitos de muitos corpos que estão além da aproximação do potencial de Hartree utilizado aqui.

2.4 Sumário

Níveis de energia de buracos, obtidos por meio de cálculos auto-consistentes, foram apresentados. Os sistemas estudados foram poços de *SiGe* crescidos em substratos de *Si* dopados tipo-p, simétrica e assimetricamente. O descasamento entre os parâmetros de rede do poço e do substrato provoca uma tensão compressiva no poço.

A separação de estados de paridades opostas, devido ao acoplamento entre as sub-bandas, causa um aumento no parâmetro *g*-efetivo, levando a um aumento dos *gaps* de energia correspondentes a fatores de preenchimento ímpares. Os valores calculados para os *gaps* apresentam bom acordo com valores experimentais de magneto-transporte. A diferença entre resultados experimentais e teóricos, para $\nu \leq 2$, é atribuída a efeitos de muitos corpos não incorporados em nosso modelo.

Capítulo 3

Teoria de Buracos Interagentes em Nanoestruturas

3.1 Introdução

Com o surgimento das máquinas de crescimento epitaxial, como MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) (Cho 1971), e o desenvolvimento das técnicas de *etching* químico, nanoestruturas de baixa dimensionalidade tornaram-se um tema de pesquisa comum, tanto do ponto de vista da ciência básica quanto tecnológica. Sistemas apresentando confinamento em duas dimensões (Fios Quânticos) e três dimensões (Pontos Quânticos) são produzidos de várias maneiras. Em particular, redes de pontos quânticos já são obtidas com disposição espacial controlada e grande similaridade entre os QDs (Sikorski e Merkt 1989). Nesse caso a tensão tornou-se uma ferramenta importante, pois é usada na fabricação de pontos quânticos auto-organizados (*self-assembled quantum dots*) (Nötzel 1996).

Técnicas experimentais também foram desenvolvidas para estudar as propriedades de elétrons confinados nessas nanoestruturas (McEuen *et al* 1991, Tewordt *et al* 1992, Ashoori *et al* 1993, Kastner 1992). Recentemente, Ashoori *et al.* carregaram QDs com um número controlado de elétrons (Ashoori *et al* 1993), revelando, experimentalmente, algumas das propriedades dos sistemas *quasi-zero*-dimensionais que já haviam sido previstas teoricamente (Wagner *et al* 1992, Maksym e Chakraborty 1992). Cálculos mostram que o estado fundamental de 2 elétrons confinados nas 3 dimensões oscila entre singleto e tripleto em função da intensidade de um campo magnético externo (Wagner *et al* 1992, Maksym e Chakraborty 1992, Peeters e Schweigert 1996).

Embora mais difíceis de serem estudados, algumas das propriedades de buracos confinados em sistemas de baixa dimensionalidade foram investigadas. Os espectros de buracos independentes confinados em *caixas* quânticas de GaAs (Valhala e Sercel 1990, Sercel e Valhala 1990) e em QDs com potencial de confinamento parabólico, (Broido et al 1992) na presença de um campo magnético externo, foram estudados. O efeito da densidade de cargas e da interação buraco-buraco na absorção de radiação infra-vermelha foi estudado através do formalismo de funcional de densidade (Darnhofer *et al* 1995). A influência de um confinamento parabólico no espectro de 2 buracos interagentes foi recentemente considerada por Pedersen et al. (Pedersen e Chang 1996). Neste capítulo, mostramos que estados de valência descritos pelo Hamiltoniano de Luttinger-Kohn apresentam efeitos importantes, associados a troca do spin pela paridade como bom número quântico. Mostraremos que o Hamiltoniano de interação pode ser separado em duas partes, uma delas consiste numa interação do tipo carga-carga e a outra numa interação do tipo paridade-paridade. Ilustraremos o efeito dessa interação dependente da paridade por meio de cálculos numéricos dos níveis de energia e do espectro de capacitância de um sistema composto por 2 buracos confinados em um QD cilíndrico de *SiGe/Si*.

3.2 Uma Partícula

3.2.a Teoria e Modelo Físico

Como foi discutido no capítulo anterior para buracos confinados em poços quânticos, uma importante característica dos estados de valência em semicondutores é o fato de que sua função de Bloch possui simetria do tipo *P*. Como consequência, a interação spin-órbita acopla o momento angular orbital com o spin, fazendo com que o último deixe de ser um bom número quântico e seja substituído por um momento angular total \vec{J} , onde $J = \frac{3}{2}$ para *HH* e *LH* e $J = \frac{1}{2}$ para *SO*. No entanto, para nanoestruturas com simetria de inversão, a paridade torna-se um bom número quântico. Nesse cálculo não incluímos a banda de valência *split-off*, por causa da dificuldade numérica gerada com sua inclusão e pelo fato de os efeitos produzidos por ela serem pequenos nos estados de mais baixa

energia, que nos interessam neste trabalho.

Nosso modelo supõe que os buracos estão confinados em um QD cilíndrico limitado por barreiras de potencial infinito. Um campo magnético externo aplicado perpendicularmente ao plano do QD é considerado, para quebrarmos certas simetrias e obtermos mais informações sobre o sistema. O efeito Zeeman é desconsiderado em nossos cálculos. Para descrever os estados HH e LH usamos o Hamiltoniano

$$H_{LK} = \begin{pmatrix} P_+ & R & -S & 0 \\ R^* & P_- & 0 & S \\ -S^* & 0 & P_- & R \\ 0 & S^* & R^* & P_+ \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

onde H_{LK} é projetado na base $J = \frac{3}{2}$, $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$. Os elementos de matriz são os correspondentes às bandas HH e LH :

$$P_+ = \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 + (\gamma_1 + \gamma_2)k_\rho^2] \quad (3.2)$$

$$P_- = \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 + (\gamma_1 - \gamma_2)k_\rho^2] \quad (3.3)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} (-\sqrt{3}) \gamma_{23} k_-^2 \quad (3.4)$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_0} (2\sqrt{3}) \gamma_3 k_- k_z \quad (3.5)$$

com $\vec{k} = -i\nabla - (e/ch)\vec{A}$, $e > 0$, $k_\pm = k_x \pm ik_y$ e $k_\rho^2 = k_x^2 + k_y^2$. O potencial vetor é escrito no calibre simétrico $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$. A aproximação axial é usada em R , onde supomos que $\gamma_3 = \gamma_2 \rightarrow (\gamma_3 + \gamma_2)/2 = \gamma_{23}$ no termo R , em (3.4).

A simetria cilíndrica do sistema define as funções de base que usaremos para descrever os buracos. Na ausência de acoplamento entre as bandas HH e LH os estados do disco poderiam ser classificados em termos do momento angular da função envelope (m) e descritos pelas funções envelope ortonormais que formam a base $\langle \mathbf{x} | m, n, \nu, m_j \rangle$:

$$\langle \mathbf{x} | m, n, \nu, m_j \rangle = \frac{\sqrt{2}}{r |J_{m+1}(k_m^n r)|} \cdot \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \cdot \xi^\nu(z) u_m(\mathbf{x}), \quad (3.6)$$

onde $J_m(x)$ é a função de Bessel de primeiro tipo de ordem m . k_m^n representa o vetor de onda do buraco, definido em termos das raízes α_m^n das funções de Bessel: $k_m^n = \alpha_m^n/r$.

sendo n o número quântico radial e r o raio do disco. $\xi^\nu(z)$ é a função envelope na direção z . Para um poço quântico de barreiras de potencial infinito e espessura w , consideramos as duas sub-bandas de mais baixa energia, correspondentes tanto aos estados HH quanto aos LH , são

$$\xi^{\nu=0}(z) = \sqrt{\frac{2}{w}} \cos(\pi z/w) \quad (3.7)$$

$$\xi^{\nu=1}(z) = \sqrt{\frac{2}{w}} \sin(2\pi z/w). \quad (3.8)$$

As funções $u_{m_j}(\vec{x})$ são a parte periódica da função de Bloch e m_j designa uma das quatro sub-bandas HH ($m_j = \pm\frac{3}{2}$) ou LH ($m_j = \pm\frac{1}{2}$).

Quando o acoplamento entre as sub-bandas é levado em conta, os buracos são representados por uma combinação linear de estados do tipo $|m, n, \nu, m_j\rangle$ e deixam de ser classificados em termos do momento angular da função envelope m . Uma classificação correta dos estados de valência, entretanto, é obtida em termos da projeção na direção z do momento angular total $L = m + m_j$.

Em razão da simetria por inversão do poço quântico, H_{LK} pode ser separado em dois blocos independentes por meio de uma transformação unitária (Broido e Sham 1985). Cada uma das soluções é classificada em termos da paridade σ e pode ser escrita na forma de um espinor de 4 componentes como:

$$|L, N, \sigma = \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{w}} \sum_n C_{n, m_j}^{L, N, \uparrow} \begin{pmatrix} f_n^{L-\frac{3}{2}}(\rho, \phi) & \cos(\pi z/w) & |m_j = \frac{+3}{2}\rangle \\ f_n^{L+\frac{1}{2}}(\rho, \phi) & \cos(\pi z/w) & |m_j = \frac{-1}{2}\rangle \\ f_n^{L-\frac{1}{2}}(\rho, \phi) & \sin(2\pi z/w) & |m_j = \frac{+1}{2}\rangle \\ f_n^{L+\frac{3}{2}}(\rho, \phi) & \sin(2\pi z/w) & |m_j = \frac{-3}{2}\rangle \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$|L, N, \sigma = \downarrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{w}} \sum_n C_{n, m_j}^{L, N, \downarrow} \begin{pmatrix} f_n^{L-\frac{3}{2}}(\rho, \phi) & \sin(2\pi z/w) & |m_j = \frac{+3}{2}\rangle \\ f_n^{L+\frac{1}{2}}(\rho, \phi) & \sin(2\pi z/w) & |m_j = \frac{-1}{2}\rangle \\ f_n^{L-\frac{1}{2}}(\rho, \phi) & \cos(\pi z/w) & |m_j = \frac{+1}{2}\rangle \\ f_n^{L+\frac{3}{2}}(\rho, \phi) & \cos(\pi z/w) & |m_j = \frac{-3}{2}\rangle \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Os estados acima possuem momento angular ($L = m + m_j$) e paridade ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) bem definidos. O número quântico N especifica um estado particular do sub-espaco $\{L, \sigma\}$. Os estados de paridades opostas são ortogonais e degenerados na ausência de campo magnético. Portanto, para uma definição adequada dos operadores de paridade, podemos considerar o número quântico σ isomórfico ao número quântico de spin.

3.2.b Resultados para buracos independentes

Nesta seção investigamos o comportamento de buracos independentes confinados em um QD de simetria cilíndrica. Para ilustrar as propriedades que caracterizam tal sistema consideramos o ponto quântico $Si_{0.87}Ge_{0.13}/Si$, com $\gamma_1 = 5.467$, $\gamma_2 = 0.846$ e $\gamma_3 = 1.997$, obtidos por uma interpolação linear entre os valores do Si e Ge . As dimensões do disco são $r = 30nm$ e $\omega = 12nm$.

O efeito do campo magnético nos estados HH e LH , na ausência de confinamento ou no caso de buracos sujeitos a um potencial de confinamento parabólico, pode ser obtido analiticamente usando-se a álgebra dos operadores de criação e aniquilação para osciladores harmônicos (como feito no capítulo anterior). No entanto, para esse sistema, em lugar de trabalharmos com as funções de osciladores harmônicos, apropriadas para um QD parabólico, nós diagonalizamos numericamente o Hamiltoniano (3.1) na base (3.6).

A Figura 3.1 revela o efeito do campo magnético e do acoplamento entre bandas nas energias de buracos leves e pesados. O gráfico 3.1(a) apresenta o espectro de buracos calculado na ausência do acoplamento entre bandas e o gráfico 3.1(b) mostra um espectro que leva em conta esse efeito. No primeiro, caso os estados são descritos por $|m, n, \nu, m_j\rangle$ e apresentam uma dispersão típica de elétrons. Os números que aparecem na Fig 3.1(a) são o valor do momento angular da função envelope (m) e as flechas representam o sinal de m_j ($+\equiv\uparrow$, $-\equiv\downarrow$). A separação dos níveis de energia em $B = 0$ se deve ao confinamento lateral. Temos orbitais s ($m = 0$), p ($m = \pm 1$), d ($m = \pm 2$), etc. Com o aumento da intensidade do campo o confinamento deixa de ser um fator determinante e os diferentes estados se unem para formar níveis de Landau (NL). O gráfico mostra estados que convergem para os seguintes NL de buracos pesados: NL_1/HH_1 , NL_2/HH_2 e NL_3/HH_3 .

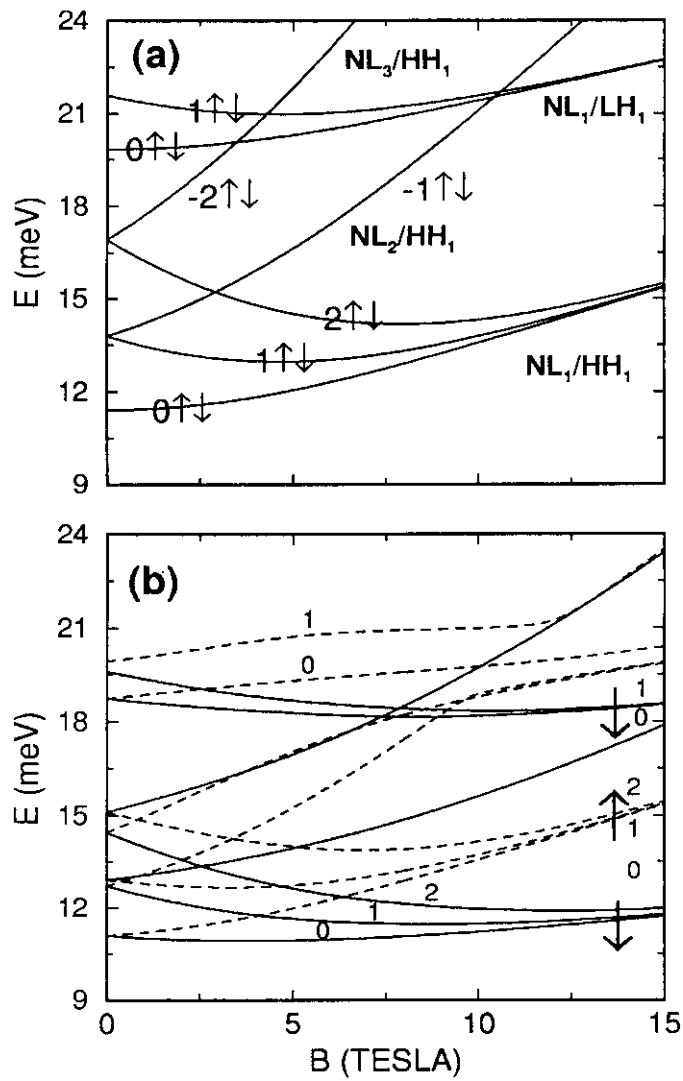


Figura 3.1: Espectro de energias de buracos independentes em função do campo magnético: (a) sem acoplamento das bandas e (b) incluindo-se o acoplamento das bandas. Na Fig.1(b) as linhas cheias representam $\sigma = \downarrow$ e linhas tracejadas $\sigma = \uparrow$.

e de buracos leves, NL_1/LH_1 .

Quando o acoplamento das bandas é incluído, a descrição dos buracos é feita em termos dos estados $|L, N, \sigma\rangle$, cujo espectro de energias apresentamos na Fig. 3.1(b). O campo magnético quebra a degenerescência entre estados com $\sigma = \uparrow$ e $\sigma = \downarrow$, fazendo com que os de mais baixa energia sejam aqueles com $\sigma = \downarrow$. A dispersão dos níveis de Landau \downarrow corresponde a de buracos com grande massa efetiva, revelando, pois, que o campo magnético acoplou as componentes $m_j = \pm 3/2$ do espinor com aquelas de $m_j = \pm 1/2$. Para energias mais altas os NL são formados por estados de paridade $\sigma = \uparrow$ e sua dispersão é muito parecida com a de NL_1/HH_1 , na Fig. 3.1(a). Os cruzamentos entre HH e LH , ilustrados na Fig. 3.1(a), dão lugar aos anti-cruzamentos vistos na parte superior de 3.1(b). Esse comportamento é devido ao acoplamento de estados com os mesmos momentos angulares e paridades.

Os espectros da Fig. 3.1 são ricos em efeitos físicos, os quais discutiremos em detalhes a seguir, para um determinado número de estados. Três diferentes aspectos determinam o comportamento dos buracos: as condições de contorno impostas pelo potencial de confinamento 3D, o acoplamento das bandas imposto por H_{LK} e o campo magnético. O efeito do campo magnético foi estudado em detalhes no capítulo anterior, para o caso de buracos em poços quânticos. As mesmas propriedades lá investigadas valem para este sistema.

Consideremos o efeito da interação entre as sub-bandas. Na ausência deste acoplamento os buracos apresentam um comportamento similar ao dos elétrons e podemos descrevê-los em termos dos estados desacoplados $|m, n, \nu, m_j\rangle$. Os estados desacoplados são 4 vezes degenerados na ausência de campo magnético, devido a equivalência entre as configurações $\pm m$ e $\pm m_j$. Um campo magnético aplicado na direção z quebra essa simetria (simetria de inversão temporal) e a degenerescência entre os estados $+m$ e $-m$ é perdida. Conforme a intensidade de B aumenta, os diferentes níveis de energia dão origem a níveis de Landau (T.Chakraborty 1992). Nesse regime, o confinamento imposto pelo campo magnético torna-se mais importante que aquele imposto pelas condições de contorno no plano da heteroestrutura.

Na Fig. 3.2 analisamos o que ocorre ao NL de mais baixa energia quando o acoplamento

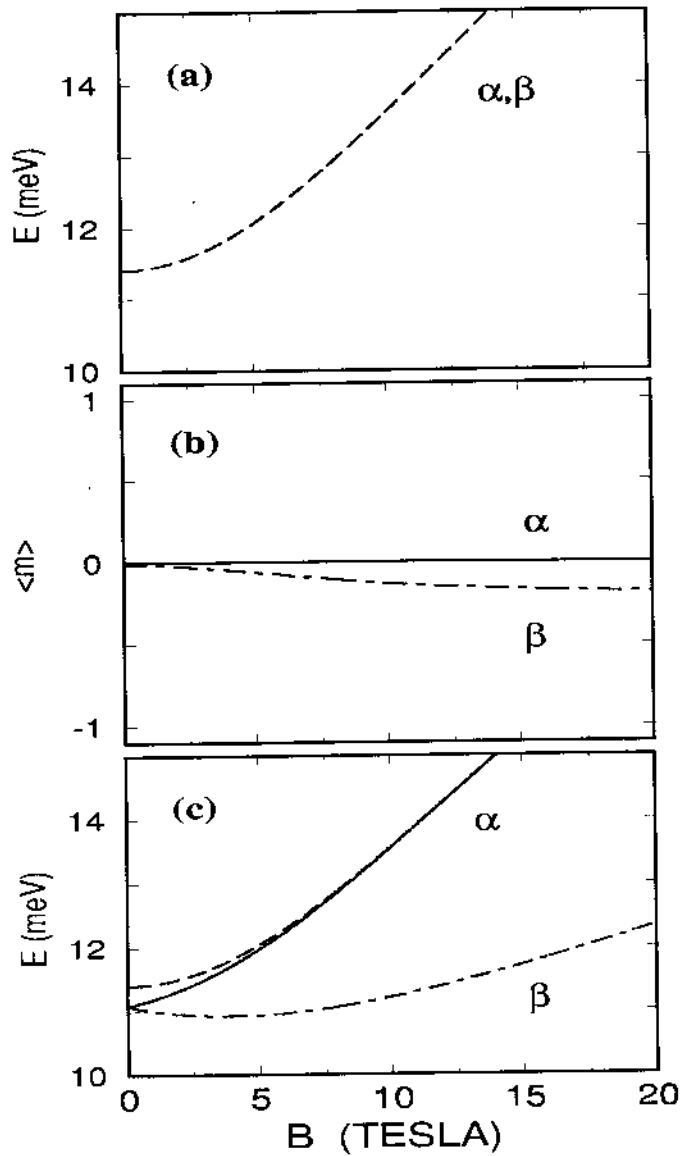


Figura 3.2: Energia do estado fundamental do buraco em função do campo magnético (B) para um sistema: (a) sem o acoplamento entre bandas e (c) incluindo-se o acoplamento. Para o caso (a) temos os estados degenerados: $|\alpha\rangle = |m=0, HH_1, m_j = \frac{3}{2}\rangle$ e $|\beta\rangle = |m=0, HH_1, m_j = -\frac{3}{2}\rangle$. Para o gráfico (c) temos: $|\alpha\rangle = |L = \frac{3}{2}, N=0, \sigma=+\rangle$ e $|\beta\rangle = |L = -\frac{3}{2}, N=0, \sigma=+\rangle$. Em (b) temos o momento angular médio $\langle m \rangle$ dos estados representados no gráfico (c).

das bandas é considerado na descrição dos buracos. A curva do gráfico 3.2(a) é duplamente degenerada e corresponde aos estados desacoplados $|\alpha\rangle = |m=0, HH_1, m_j = \frac{3}{2}\rangle$ e $|\beta\rangle = |m=0, HH_1, m_j = -\frac{3}{2}\rangle$. No entanto, quando o acoplamento entre as sub-bandas é levado em conta (Figura 3.2(c)), os novos estados tomam a forma de espinores, descritos por $|\alpha\rangle = |L = \frac{3}{2}, N=0, \sigma=\uparrow\rangle$ e $|\beta\rangle = |L = -\frac{3}{2}, N=0, \sigma=\downarrow\rangle$. Os novos estados continuam degenerados a $B=0$ (degenerescência de Kramers), mas a presença do campo magnético separa os estados de paridades opostas. Sem a influência do campo, o estado $|\alpha\rangle = |\frac{3}{2}, 0, \uparrow\rangle$ (linha cheia do gráfico 3.2(c)) tem uma forte projeção em $m=0$ (correspondendo ao estado HH_1 puro), sendo esta componente fracamente acoplada as $m=2, 1, 3$ (LH_1, LH_2, HH_2). Esse efeito é indicado, em $B=0$, pela pequena diferença de energia entre as curvas de linha cheia e tracejada, a última reproduzida do gráfico 3.2(a) apenas como referência. Portanto, concluímos que o estado $|\alpha\rangle$ é um estado anômalo. Esse aspecto também pode ser visto na Fig. 3.2(b), onde verificamos que o campo magnético praticamente não tem influência sobre $\langle m \rangle$, o momento angular médio da função envelope. É importante notar na Fig. 3.2(c) que conforme B aumenta, as linhas cheias e tracejadas se sobrepõem uma à outra. Isso acontece porque o efeito causado pelo campo magnético é o de acoplar a componente $m=0$ do espinor $|\alpha\rangle = |\frac{3}{2}, 0, \uparrow\rangle$, que corresponde a NL_1/HH_1 , com outros estados NL_y ($y \neq 1$). Entretanto todas as outras componentes desse espinor ($m=2, 1, 3$) correspondem aos primeiros NL_1 de outras sub-bandas (LH_1, HH_2, LH_2). Consequentemente, o campo magnético enfraquece o acoplamento das bandas que é devido ao confinamento lateral, no caso desse estado. O fato de $|\alpha\rangle$ não ser completamente anômalo, como aconteceria no caso bidimensional, é consequência das condições de contorno no plano do disco. Quando B aumenta, as paredes do disco perdem sua influência sobre o estado $|\frac{3}{2}, 0, \uparrow\rangle$ e este recobra seu caráter de estado desacoplado $|m=0, HH_1, m_j = 3/2\rangle$.

Por outro lado, o campo magnético acopla consideravelmente as sub-bandas do espinor $|\beta\rangle = |-\frac{3}{2}, 0, \downarrow\rangle$ (linha traço-ponto), cujas componentes são $m = -3, -1, -2$ e 0 , correspondentes aos níveis de Landau NL_4/HH_2 , NL_2/LH_2 , NL_3/LH_1 e NL_1/HH_1 . A forte mistura de bandas apresentada por esse estado torna-se clara ao notarmos que a

dispersão de $|\beta\rangle$, em função de B , corresponde à dispersão de um estado de massa efetiva maior que HH_1 , este representado pela linha cheia.

A Fig. 3.3 apresenta a influência do campo magnético em outro conjunto de estados. Quando o acoplamento das bandas não é levado em conta, escrevemos para esses estados: $|\alpha\rangle = |1, HH_1, 3/2\rangle$, $|\gamma\rangle = |1, HH_1, -3/2\rangle$, $|\beta\rangle = |-1, HH_1, 3/2\rangle$ e $|\delta\rangle = |-1, HH_1, -3/2\rangle$. Os estados $|\alpha\rangle$ e $|\gamma\rangle$ são estados de borda (Lent 1991); são assim chamados porque o confinamento no plano do disco faz com que sua dispersão em energia se separe das de $|\beta\rangle$ e $|\delta\rangle$. Notamos que a energia desses buracos inicialmente diminui com B , fato que não ocorreria em um sistema bidimensional. Na ausência de ambos, campo magnético e acoplamento entre bandas, os quatro estados são degenerados ($\pm m, \pm m_j$). O campo magnético separa a energia desses estados em dois ramos, que correspondem aos valores positivos e negativos de m (Fig. 3.3(a)).

Pelo acoplamento das bandas, os estados acima tornam-se apenas componentes mais fortes dos seguintes espinores: $|\alpha\rangle = |\frac{5}{2}, 0, \uparrow\rangle$, $|\gamma\rangle = |-\frac{1}{2}, 0, \downarrow\rangle$, $|\beta\rangle = |\frac{1}{2}, 0, \uparrow\rangle$ e $|\delta\rangle = |-\frac{5}{2}, 0, \downarrow\rangle$. Nos gráficos 3.3 (b) e (c) as linhas sólidas indicam os estados com $\sigma = \uparrow$ e as linhas traço-ponto os estados com $\sigma = \downarrow$. Na ausência de campo os estados $|L, N, \uparrow\rangle$ e $|-L, N, \downarrow\rangle$ são degenerados, mas o acoplamento entre bandas quebra a degenerescência entre aqueles que têm $|L|$ diferentes. Tendo em vista $|\frac{5}{2}, 0, \uparrow\rangle$, observamos que todas as componentes desse espinor pertencem ao primeiro nível de Landau de diferentes sub-bandas e, portanto, devemos esperar um pequeno acoplamento entre tais componentes a altos campos magnéticos. De fato, vemos na Fig. 3.3(c), o campo magnético diminui o acoplamento existente em $B = 0$, que é causado pelo confinamento lateral no plano do disco. A curva que representa o estado $|\alpha\rangle$ (linha cheia) aproxima-se da linha tracejada, que representa um estado puro do tipo $m = 1$ (HH_1) (copiado do gráfico 3.3(a) como referência). Algo parecido ocorre com o estado $|\beta\rangle$, mas nesse caso um pequeno acoplamento é introduzido pelo campo magnético, porque $|\beta\rangle$ não é inteiramente anômalo. Para $B \approx 10T$ o estado $|\beta\rangle$ apresenta um anti-cruzamento abrupto, que demonstra o fraco acoplamento entre as componentes desse espinor. Depois do anti-cruzamento, $|\beta\rangle$ adquire uma dispersão que é próxima a do estado $m = 1$ (LH_1).

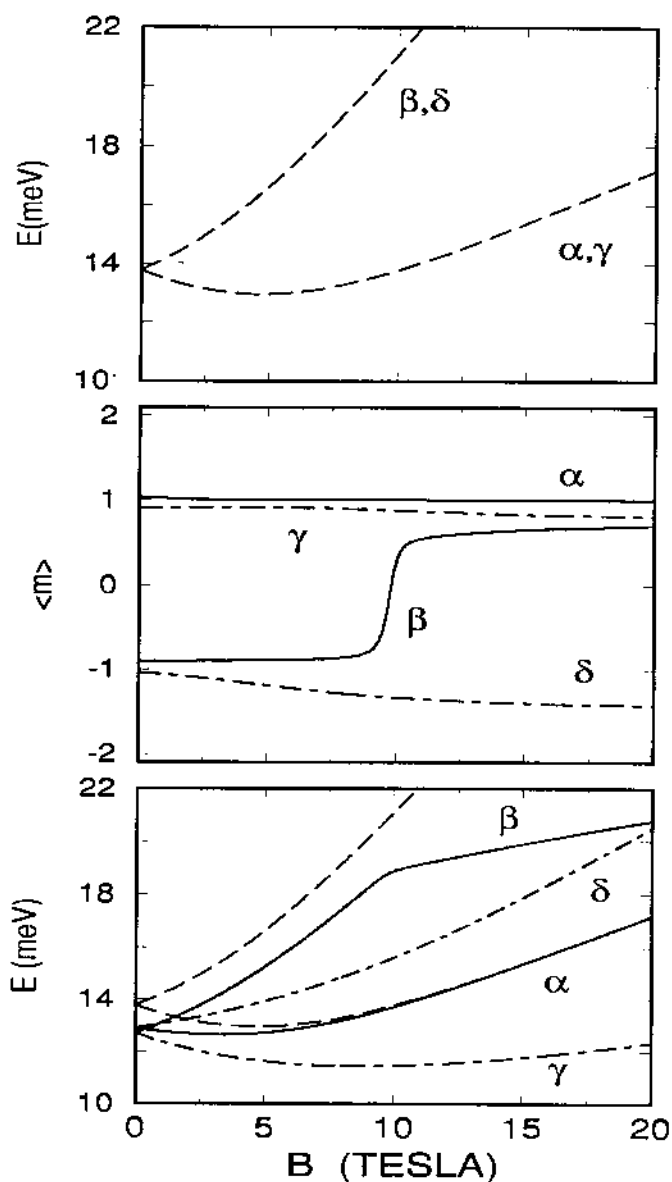


Figura 3.3: Energia do buraco em função do campo magnético para um sistema: (a) sem acoplamento entre bandas e (c) incluindo-se o acoplamento. Para o caso (a) temos os seguintes estados degenerados: $|\alpha\rangle = |m = 1, HH_1, m_j = \frac{3}{2}\rangle$ e $|\gamma\rangle = |1, HH_1, -\frac{3}{2}\rangle$; $|\beta\rangle = |-1, HH_1, \frac{3}{2}\rangle$ e $|\delta\rangle = |-1, HH_1, -\frac{3}{2}\rangle$. Para o gráfico (c) temos: $|\alpha\rangle = |L = \frac{5}{2}, N = 0, \sigma = \uparrow\rangle$ e $|\gamma\rangle = |-\frac{1}{2}, 0, \downarrow\rangle$, $|\beta\rangle = |\frac{1}{2}, 0, \uparrow\rangle$ e $|\delta\rangle = |-\frac{5}{2}, 0, \downarrow\rangle$. Em (b) temos o momento angular médio $\langle m \rangle$ dos estados representados no gráfico (c).

No gráfico 3.3(b), o momento angular médio da função envelope, destaca esse efeito. Para os estados $|\gamma\rangle = |-\frac{1}{2}, 0, \downarrow\rangle$ e $|\delta\rangle = |-\frac{5}{2}, 0, \downarrow\rangle$, o campo magnético age de forma a aumentar continuamente o acoplamento entre as sub-bandas, como pode ser visto em termos de $\langle m \rangle$.

A mesma linha de raciocínio pode ser aplicada na análise dos demais estados. Como um dos resultados dessa discussão, podemos pensar que o acoplamento das sub-bandas produzido pelo Hamiltoniano H_{LK} funciona como um efeito Zeeman efetivo, que separa os estados de paridades opostas conforme a intensidade de B aumenta, reforçando o isomorfismo entre spin e paridade sugerido anteriormente.

3.2.c Hamiltoniano de Buracos Interagentes

Nesta seção enfocamos a interação Coulombiana entre buracos. O Hamiltoniano de buracos interagentes será escrito em termos de uma base formada por estados de buracos independentes $|j\rangle = |L, N, \sigma\rangle$ obtidos a campo magnético nulo. O Hamiltoniano $H = H_0 + V_{hh}$ é composto por um termo correspondente às interações de uma partícula (H_0) e outro que representa a interação Coulombiana entre os buracos (V_{hh}). Assim, H pode ser escrito, de forma geral, em segunda quantização como

$$H = \sum_j E_j c_j^\dagger c_j + \sum_{j',j} U_{j'j} c_{j'}^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} V_{j_1 j_2 j_3 j_4} c_{j_1}^\dagger c_{j_2}^\dagger c_{j_3} c_{j_4}, \quad (3.11)$$

onde E_j são as energias de uma partícula. Por trabalharmos com funções de base que são autofunções de H_{LK} na ausência de campo, temos $U_{j'j}$, que são os elementos de matriz que representam o espalhamento dos buracos pelo campo magnético. $V_{j_1 j_2 j_3 j_4}$ são os elementos de matriz que descrevem a interação Coulombiana entre dois buracos. Definimos estes elementos de matriz no Apêndice B.

A interação Coulombiana não conserva o momento angular individual dos buracos, mas sim o momento angular total do sistema $L_t = \sum_i L_i$.

Para que possamos analisar o efeito da interação Coulombiana na configuração das paridades do sistema, lembramos que os estados de buracos independentes $|L, N, \uparrow\rangle$ e $|L, N, \downarrow\rangle$ são degenerados. Portanto, a mesma simetria, com respeito a inversão simultânea

de momento angular e paridade, deve valer para os elementos de matriz da interação Coulombiana. Considerando os elementos de matriz V para as diferentes configurações de paridades, temos

- a) se $\sigma_1 = \sigma_4$ e $\sigma_2 = \sigma_3$, $\langle \sigma_1 \sigma_2 | V_{hh} | \sigma_2 \sigma_1 \rangle = V_D$
- b) se $\sigma_1 \neq \sigma_4$ e $\sigma_2 \neq \sigma_3$, $\langle \sigma_1 \sigma_2 | V_{hh} | \sigma_3 \sigma_4 \rangle = V_X$
- c) se apenas uma das partículas muda sua paridade $\langle V_{hh} \rangle = 0$.

Usando as propriedades de simetria de V_{hh} podemos escrever o termo de interação buraco-buraco como

$$\begin{aligned}
 V = \frac{1}{2} \sum_{\{L\}} \sum_{\{N\}} \{ & V_D^{L_1, L_2, L_3, L_4} [c_{L_1 N_1 \uparrow}^+ c_{L_2 N_2 \uparrow}^+ c_{L_3 N_3 \uparrow} c_{L_4 N_4 \uparrow} \\
 & + c_{-L_1 N_1 \downarrow}^+ c_{-L_2 N_2 \downarrow}^+ c_{-L_3 N_3 \downarrow} c_{-L_4 N_4 \downarrow} \\
 & + c_{L_1 N_1 \uparrow}^+ c_{-L_2 N_2 \downarrow}^+ c_{-L_3 N_3 \downarrow} c_{L_4 N_4 \uparrow} \\
 & + c_{-L_1 N_1 \downarrow}^+ c_{L_2 N_2 \uparrow}^+ c_{L_3 N_3 \uparrow} c_{-L_4 N_4 \downarrow}] \\
 & + V_X^{L_1, L_2, L_3, L_4} [c_{L_1 N_1 \uparrow}^+ c_{L_2 N_2 \uparrow}^+ c_{L_3 N_3 \downarrow} c_{L_4 N_4 \downarrow} \\
 & + c_{-L_1 N_1 \downarrow}^+ c_{-L_2 N_2 \downarrow}^+ c_{-L_3 N_3 \uparrow} c_{-L_4 N_4 \uparrow} \\
 & + c_{L_1 N_1 \uparrow}^+ c_{-L_2 N_2 \downarrow}^+ c_{-L_3 N_3 \uparrow} c_{L_4 N_4 \downarrow} \\
 & + c_{-L_1 N_1 \downarrow}^+ c_{L_2 N_2 \uparrow}^+ c_{L_3 N_3 \downarrow} c_{-L_4 N_4 \uparrow}] \} . \quad (3.12)
 \end{aligned}$$

Definindo o seguinte conjunto de operadores de carga (ρ) e paridade (λ)

$$\rho_{i,j} = c_{L_i N_i \uparrow}^+ c_{L_j N_j \uparrow} + c_{-L_i N_i \downarrow}^+ c_{-L_j N_j \downarrow} \quad (3.13)$$

$$\lambda_{i,j}^x = c_{L_i N_i \uparrow}^+ c_{L_j N_j \downarrow} + c_{-L_i N_i \downarrow}^+ c_{-L_j N_j \uparrow} , \quad (3.14)$$

podemos reescrever o termo de interação buraco-buraco, exceto por termos lineares em ρ e λ , como

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\{L\}} \sum_{\{N\}} \{ V_D \rho_{14} \rho_{23} + V_X \lambda_{14}^x \lambda_{23}^x \} . \quad (3.15)$$

Na expressão acima o primeiro termo está relacionado a mudanças na densidade de carga do sistema. No entanto, o aspecto importante dessa expressão, que a distingue da interação elétron-elétron, é a presença de um termo dependente da paridade, representado

por V_X . O mesmo tipo de Hamiltoniano descreve elétrons confinados em duas camadas (Palacios e Hawrylak 1995), o que nos leva a concluir que o papel desempenhado pela paridade no caso de buracos confinados em um QD é o mesmo daquele desempenhado pelo *isospin* em sistemas eletrônicos de duas camadas.

3.2.d Resultados para Dois Buracos e Discussões

Os resultados da seção anterior são válidos para um número arbitrário de buracos, confinados em poços quânticos ou pontos quânticos com a devida simetria de inversão. Porém, devido a sua complexidade computacional, ilustramos essa teoria apresentando resultados de cálculos numéricos realizados para dois buracos confinados em um QD cilíndrico, na presença de um campo magnético. Em nossa análise nos restringimos aos estados de mais baixa energia, que apresentam uma forte característica de buracos pesados (HH_1). Os estados de 1 buraco são usados para construir uma base de estados de 2 buracos $|L_1, N_1, \sigma_1; L_2, N_2, \sigma_2\rangle$, onde o Hamiltoniano $H = H_0 + V_{hh}$ é diagonalizado. Pode-se, alternativamente, classificar os estados em termos das configurações de suas paridades, tripleto ou singleto, como no caso de elétrons em QD de dupla barreira (Palacios e Hawrylak 1995).

Um efeito importante da interação Coulombiana entre buracos é o acoplamento entre estados de diferentes paridades, por exemplo $\langle \downarrow, \downarrow | V_{hh} | \uparrow, \uparrow \rangle$. Tal acoplamento não ocorre entre elétrons com a mesma configuração de spins. A Figura 3.4 ilustra esse efeito; seus gráficos apresentam a projeção de estados de 2 buracos em estados $|m, n, \nu, m_j\rangle$ de 1 buraco, com momento angular envelope m . Consideremos os seguintes estados de 2 buracos:

$$|L_1 \uparrow, L_2 \uparrow\rangle = c_{L_1=\frac{1}{2}\uparrow}^+ c_{L_2=-\frac{1}{2}\uparrow}^+ |0\rangle \quad (3.16)$$

$$|L_1 \downarrow, L_2 \downarrow\rangle = c_{L_1=\frac{1}{2}\downarrow}^+ c_{L_2=-\frac{1}{2}\downarrow}^+ |0\rangle \quad (3.17)$$

Supomos 4 casos diferentes: a) um sistema sem acoplamento de bandas e sem interação Coulombiana entre os buracos; b) um sistema sem acoplamento de bandas, mas que leva em conta a interação Coulombiana entre os buracos; c) um sistema que leva em conta o

acoplamento das bandas, mas despreza a interação Coulombiana entre buracos e, por fim, d) um sistema onde o acoplamento entre as bandas e a interação Coulombiana são levados em conta. No gráfico 3.4(a) os números de ocupação correspondem ao de partículas livres. Quando somente a interação Coulombiana é incorporada ao sistema (Fig. 3.4(b)), o estado $|L_1 \uparrow, L_2 \uparrow\rangle$ adquire uma pequena projeção nos momentos angulares $m = 3$ e $m = 0$, que não contribuíam para a descrição dos buracos independentes. Da mesma forma, o estado $|L_1 \downarrow, L_2 \downarrow\rangle$ adquire uma pequena projeção nos momentos angulares $m = -3$ e $m = 0$. Entretanto, nenhum acoplamento se manifesta entre os estados $|L_1 \uparrow, L_2 \uparrow\rangle$ e $|L_1 \downarrow, L_2 \downarrow\rangle$, porque sem a mistura de bandas $\langle L_1 \uparrow, L_2 \uparrow | V_{hh} | L_1 \downarrow, L_2 \downarrow \rangle = 0$.

Por outro lado, considerando-se o efeito do acoplamento entre bandas e desprezando-se a interação Coulombiana, passamos a descrever os estados $|L_1 \uparrow, L_2 \uparrow\rangle$ e $|L_1 \downarrow, L_2 \downarrow\rangle$ em termos dos espinores (3.9) e (3.11). Neste caso os estados passam a ter uma projeção não nula nos momentos angulares $m = -2, -1, 0, 1$ e 2 , como pode ser visto na Fig. 3.4(c). Mas ainda não há interação entre eles, porque L e σ são autovalores de H_{LK} .

Todavia, quando levamos em conta o efeito conjunto do acoplamento das bandas e da interação Coulombiana temos os números de ocupação apresentados na Fig. 3.4(d). Observamos que ambos os estados estão acoplados, apresentando uma projeção muito similar nos momentos angulares m . Isso é consequência do fato de que $\langle L_1 \uparrow, L_2 \uparrow | V_{hh} | L_1 \downarrow, L_2 \downarrow \rangle \neq 0$ quando o acoplamento das bandas é incluído.

As Figuras 3.5 e 3.6 apresentam o espectro de energia, as configurações das paridades e o momento angular total do estado fundamental de dois buracos, em função do campo magnético. Na Fig. 3.5 os buracos HH e LH são descritos sem que seja levado em conta o acoplamento das bandas. Conforme o campo magnético aumenta, a paridade total do estado fundamental oscila entre singlete e tripleto, como mostra a Fig. 3.5(b). Esse é um efeito conhecido, causado pela interação Coulombiana entre as partículas (Wagner *et al* 1992, Maksym e Chakraborty 1992). A Fig. 3.5(c) mostra que o momento angular total da função envelope do sistema ($M = m_1 + m_2$) muda juntamente com a configuração das paridades; os valores pares de M estão associados aos estados do tipo singlete e os valores ímpares aos estados do tipo tripleto. Para entendermos esse

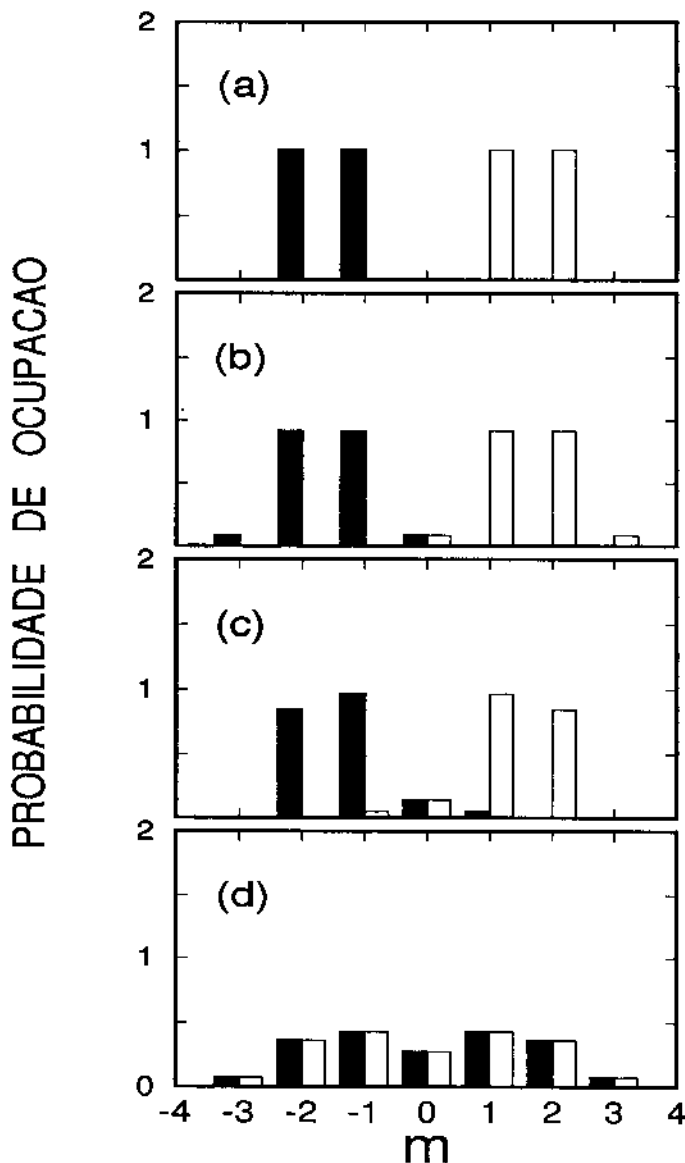


Figura 3.4: Probabilidade de ocupação dos momentos angulares m de 1 buraco para os estados de 2 buracos: $|\frac{1}{2} \uparrow, -\frac{1}{2} \uparrow\rangle$ (barras brancas) e $|\frac{1}{2} \downarrow, -\frac{1}{2} \downarrow\rangle$ (barras escuras), para $B = 0$. Consideramos as seguintes condições: (a) sem acoplamento entre bandas e sem interação Coulombiana, (b) sem acoplamento entre bandas mas com interação Coulombiana, (c) com acoplamento entre bandas mas sem interação Coulombiana, e (d) acoplamento entre bandas e interação Coulombiana incluídas.

mecanismo devemos lembrar que as diferenças de energia entre os estados que formam um mesmo NL diminuem com o aumento da intensidade de B , como pode ser visto na Fig. 3.1(a). Como esses estados têm momentos angulares m diferentes, torna-se energeticamente mais favorável para um sistema, cujas partículas estão sujeitas a um potencial repulsivo, quando uma delas passa para um estado de momento angular mais alto. Nesse caso, a distância média entre as partículas aumenta, diminuindo a energia de interação entre elas. Para manter a anti-simetria dos estados, a configuração das paridades muda com o momento angular.

Quando o acoplamento das bandas é incluído, nós obtemos um comportamento diferente, ilustrado na Fig. 3.6. A principal consequência desse acoplamento, é o fim do comportamento oscilatório apresentado pela paridade do estado fundamental. Após a primeira transição, de singleto para tripleto, o estado fundamental mantém a configuração $|\downarrow\downarrow\rangle$ para altos valores do campo. Devido a ação conjunta do campo magnético e da interação buraco-buraco, a degenerescência entre os três estados que compõem o tripleto é quebrada. O fato do campo magnético fazer com que os estados de paridade $|\downarrow\downarrow\rangle$ sejam os de mais baixa energia pode ser entendido ao analisarmos os estados de 1 buraco apresentados na Fig. 3.1(b). Os resultados dessa figura mostram que o campo magnético aumenta o acoplamento entre bandas para os espinores de paridade \downarrow , fazendo com que sua massa efetiva aumente.

Ainda que a paridade do sistema não sofra transições para $B > 1T$, o momento angular total do sistema continua mudando em função do campo magnético, como mostra a Fig. 3.6(c). Contudo, o sistema ocupa somente estados de momento angular ímpar. A Figura (c) ilustra a média do momento angular total da função envelope do sistema $\langle M \rangle$ (linha sólida). A linha tracejada é uma referência e corresponde a situação equivalente, mas sem o acoplamento entre as bandas. Como havíamos observado anteriormente, os valores ímpares de M estão ligados a estados cuja configuração das paridades é do tipo tripleto. O fato das duas curvas do gráfico 3.6 se separarem com o aumento de B é outra indicação de que o campo magnético está reforçando a mistura de bandas para esses estados. Esse comportamento reforça a interpretação anterior, de que o acoplamento das

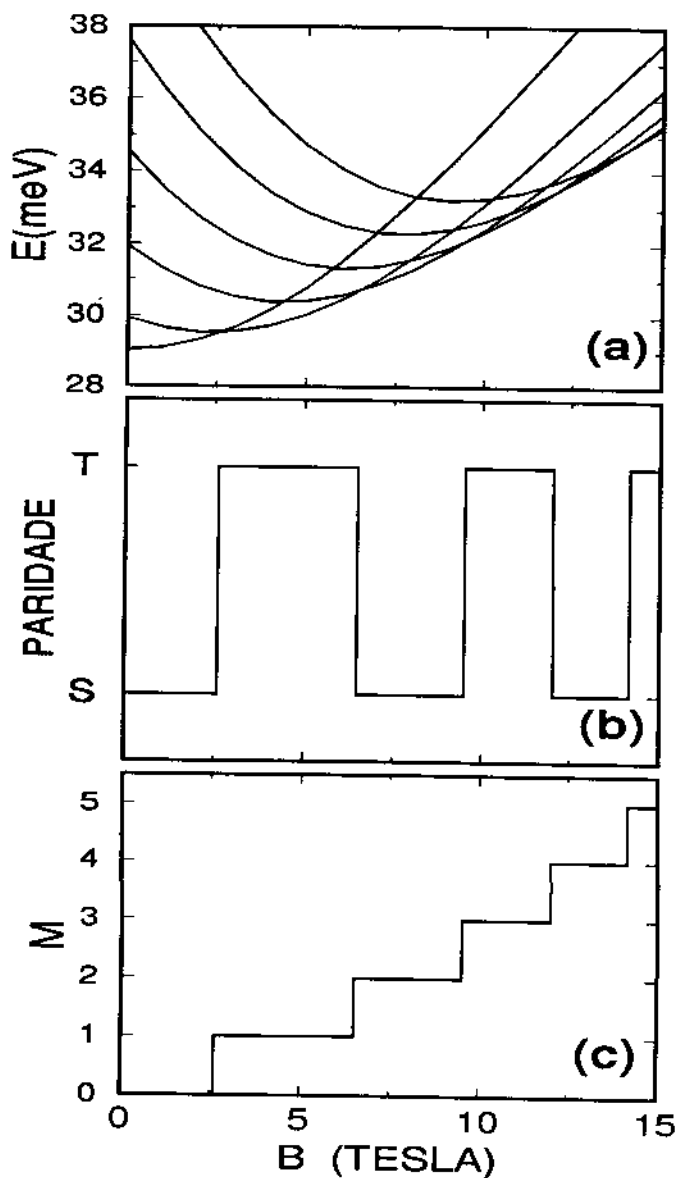


Figura 3.5: (a) Energias de estados de dois buracos sem a inclusão do acoplamento das bandas (interação Coulombiana incluída), em função do campo magnético. (b) Oscilações do estado fundamental entre configurações de paridade do tipo singlete e tripleto. (c) Momento angular total ($M = m_1 + m_2$) do estado fundamental em função de B .

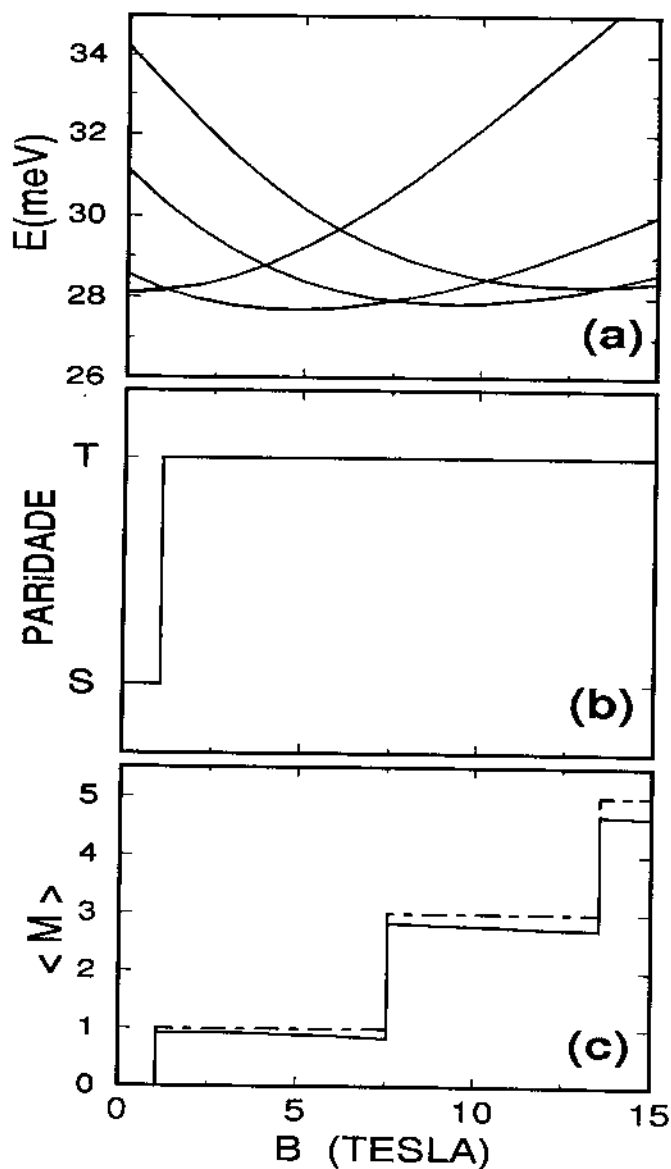


Figura 3.6: (a) Energias de estados de dois buracos incluindo-se acoplamento entre bandas e a interação Coulombiana, em função do campo magnético. (b) Configuração da paridade do estado fundamental. (c) Momento angular total médio ($\langle M \rangle$) do estado fundamental (linha sólida). A linha traço-ponto é o resultado equivalente na ausência de acoplamento.

bandas pode ser visto como um "efeito Zeeman" efetivo.

Os efeitos da interação buraco-buraco podem ser medidos em experimentos de espectroscopia de capacitância eletrônica (SECS, *Single Electron Capacitance Spectroscopy*). SECS mede o potencial químico do QD, $\mu(N) \equiv E_{GS}(N) - E_{GS}(N - 1)$ em função do número de partículas confinadas (Ashoori *et al* 1993). Na Figura 3.7(a) temos a evolução de $\mu(N)$ com o campo magnético para $N = 1, 2$. A Fig. 3.7(b) ilustra a energia potencial do estado fundamental do sistema, $U \equiv E_{GS}^{int}(N = 2) - E_{GS}^{nao\ int}(N = 2)$, para 2 buracos. O valor dominante do momento angular do sistema é indicado; podemos ver que as transições do estado fundamental para órbitas de maior M , causadas pelo aumento de B , fazem os buracos se distanciarem um do outro e a energia de interação diminuir.

3.2.e Sumário

Neste capítulo estudamos as propriedades de 1 e 2 buracos confinados em um QD cilíndrico, em função do campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do disco. Verificamos que os estados podem ser classificados em termos de sua paridade e que o campo magnético desempenha um papel importante ao controlar o acoplamento das bandas para os estados de menor energia. Mostramos, para os sistemas que apresentam simetria de inversão na direção z , que a interação Coulombiana entre buracos pode ser dividida em dois termos: um deles preserva a paridade dos estados e o outro acopla estados de diferentes paridades. Diagonalizamos numericamente o Hamiltoniano de Luttinger-Kohn para dois buracos e os resultados revelaram que as oscilações entre estados singleto e tripleto, próprias de elétrons confinados nesse tipo de heteroestrutura, não ocorrem em um sistema de buracos. A dependência da energia de interação no espectro de capacitância foi investigada em função do campo magnético.

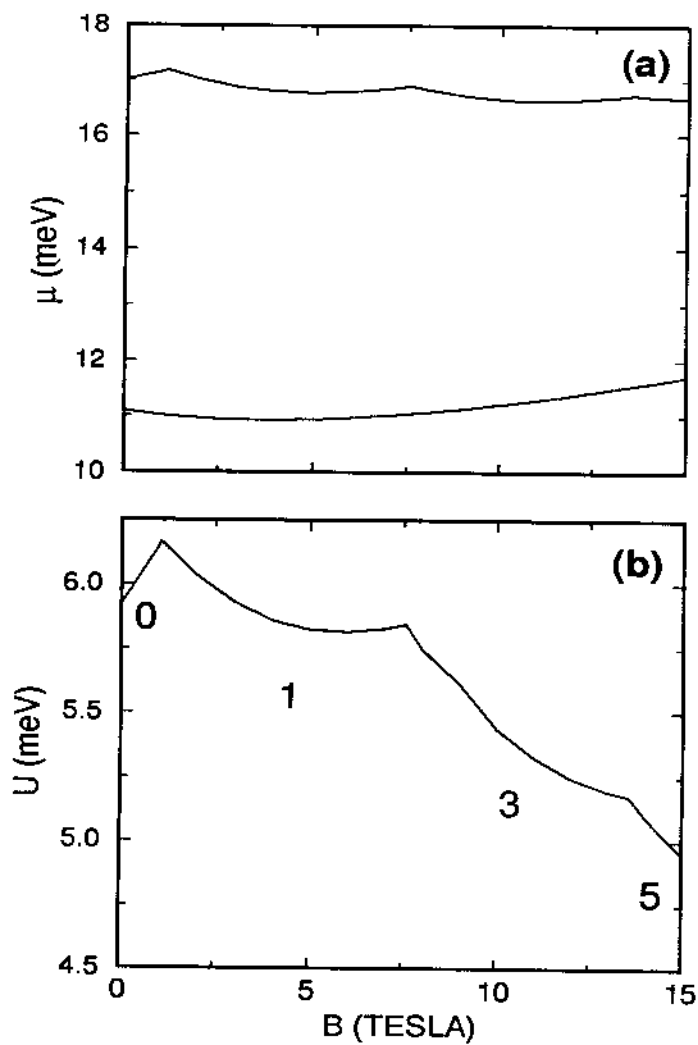


Figura 3.7: (a) Potencial químico, $\mu(N) \equiv E_{GS}(N) - E_{GS}(N-1)$, para $N = 2$ (curva superior) e $N = 1$ (curva inferior), em função do campo magnético. (b) Energia de interação do estado fundamental de dois buracos $U \equiv E_{GS}^{int}(N=2) - E_{GS}^{nao\ int}(N=2)$.

Capítulo 4

Centros A^0 e A^+ em Nanoestruturas de $SiGe/Si$

4.1 Introdução

As impurezas têm papel central na física de semicondutores. Uma das razões da grande importância dos semicondutores, tanto em termos tecnológicos como científicos, é o fato de que podemos dopá-los de maneira e em quantidades extremamente precisas, para conseguir um material com as propriedades eletrônicas desejadas. As impurezas geram estados com energia entre as bandas de valência e condução, que têm grande influência nas propriedades ópticas e de transporte do material. Quando o átomo de impureza apresenta valência diferente daquela dos materiais que compõe o cristal, um elétron (impureza doadora) ou um buraco (impureza aceitadora) podem ser criados na banda de condução ou de valência, respectivamente. Os estados de impurezas podem ser classificados de forma geral como rasos (tipo hidrogenóide) ou profundos. Os estados rasos são aqueles passíveis de uma descrição em termos da teoria de massa efetiva (Yu e Cardona 1996) e têm as características físicas de átomos hidrogenóides. Os estados profundos não podem ser descritos por este formalismo. Em razão de sua pequena energia de ligação, as impurezas rasas podem ser ionizadas facilmente, criando um gás de elétrons ou buracos. Esta propriedade é responsável pela versatilidade dos semicondutores, desejada na maioria das aplicações.

Neste capítulo estudamos algumas das propriedades de buracos ligados a uma impureza aceitadora ideal¹, confinados em um sistema de baixa dimensionalidade. Iniciamos com

¹Por ideal consideramos uma impureza cujos estados de caroço não têm influência nos estados de

uma discussão a respeito dos estados de impurezas neutras: doadores (D^0) e aceitadores (A^0). Em seguida consideramos a presença de um segundo buraco ligado a impureza aceitadora, formando o centro A^+ .

As primeiras teorias propostas para descrever o espectro de impurezas aceitadoras surgiram na década de 50 (Kittel e Mitchell 1954, Kohn e Schechter 1955) e foram aplicadas ao cálculo do estado fundamental de aceitadores em germânio e silício. Mais tarde, o modelo esférico para estados de impurezas aceitadoras rasas (Baldereschi e Lipari 1973) contribuiu para o entendimento do problema. Nesse modelo o Hamiltoniano de Luttinger-Kohn é separado em componentes de simetrias esféricas e cúbicas. Os termos de simetria cúbica tem menor efeito na maioria dos semicondutores e podem ser tratados em teoria de perturbação (Baldereschi e Lipari 1974). Desprezando-se os termos de simetria cúbica, o Hamiltoniano do sistema A^0 torna-se isomorfo ao de um átomo hidrogenóide, com um termo de acoplamento do tipo spin-órbita; uma notação espectroscópica é usada na descrição do sistema.

No caso de impurezas em heteroestruturas a aproximação esférica deixa de ser vantajosa, em virtude das novas condições de contorno impostas ao sistema. O primeiro cálculo da energia de ligação de um aceitador em um sistema *quasi*-bidimensional foi feito por Bastard (Bastard 1981) para um poço de *GaAs* com barreiras infinitas. Mais recentemente, o espectro teórico de aceitadores em poços de *GaAs/AlGaAs* foi obtido em termos de um modelo mais realista (Masselink *et al* 1985) e, posteriormente, usado na interpretação de resultados experimentais para poços de diversas larguras (Boffety *et al* 1996). Tais cálculos foram realizados a partir do Hamiltoniano de Luttinger-Kohn, levando-se em conta a presença de campos elétricos e magnéticos. Embora os primeiros dados experimentais do espectro de impurezas aceitadoras em sistemas 3D tenham sido obtidos em cristais de germânio e silício, a quase totalidade dos trabalhos em heteroestruturas corresponde aos materiais do grupo III-V².

valência da impureza.

²Não existem na literatura, que sejam de conhecimento do autor, medidas do espectro de aceitadores em heteroestruturas formadas pela liga *SiGe/Si*.

O estudo dos centros A^+ está geralmente limitado aos sistemas de baixa dimensionalidade por duas razões. Primeiramente, a produção controlada de tais centros só é possível graças à dopagem modulada da barreira. Segundo, o confinamento aumenta sua energia de ligação, tornando possível sua observação. Usando o modelo esférico, Rodina (1993) calculou a energia de ligação de um centro A^+ tridimensional para semicondutores de estrutura cristalina do tipo diamante.

4.2 Estados de Impurezas Neutras

4.2.a Impurezas hidrogenóides em semicondutores dopados tipo-n (D^0).

As impurezas doadoras rasas têm energia pouco abaixo do fundo da banda de condução, o que simplifica a solução do problema, pois geralmente descrevemos a banda de condução em termos de uma dispersão parabólica. Qualitativamente podemos entender esse sistema da seguinte maneira. Os elétrons de caroço da impureza, juntamente com os elétrons de valência dos átomos vizinhos, blindam o potencial atômico do doador de modo bastante efetivo. Em razão disso, o elétron de valência excedente liga-se fracamente a impureza, com seu raio orbital abrangendo várias células unitárias da rede cristalina. O sistema se comporta como um átomo tipicamente hidrogenóide, cujo elétron realiza uma grande órbita através do potencial da rede cristalina, que, por sua vez, confere suas características ao sistema em termos da massa efetiva do elétron e da constante dielétrica do cristal. Este modelo pode ser desenvolvido formalmente a partir da teoria de massa efetiva (para uma revisão vide (Yu e Cardona 1996)).

Considerando uma impureza ideal, o Hamiltoniano que descreve o sistema D^0 tridimensional é

$$H = \frac{p^2}{2m_e^*} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (4.1)$$

Conforme a aproximação da função envelope, a energia de ligação de uma impureza doadora tridimensional pode ser obtida analiticamente e é igual a $E_{3D} = \frac{m_e^* e^4}{2\epsilon_0 \hbar^2} = 1 Ry^*$, onde Ry^* representa a energia de Rydberg efetiva do material. As constantes m_e^* e ϵ_0 são a

massa efetiva e a constante dielétrica estática do meio. Uma solução analítica também pode ser conseguida para o estado fundamental de um sistema bidimensional puro. Para tanto aplicamos o método variacional à função de teste $\Psi(r) = \text{const} \times e^{-\frac{r\alpha}{a_0}}$; sendo α o parâmetro variacional, $a_0 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m_e^* e^2}$ o raio de Bohr efetivo e $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. O parâmetro $\alpha = 2$ minimiza a energia do sistema e temos $E_{2D} = 4Ry^*$ para a energia de ionização de uma impureza hidrogenóide bidimensional.

4.2.b Impurezas hidrogenóides em nanoestruturas dopadas tipo-p (A^0).

O estudo das propriedades de buracos ligados a impurezas aceitadoras, por outro lado, é bastante dificultado devido a complexidade intrínseca à descrição da banda de valência. Antes de considerarmos um sistema mais complexo, que envolve dois buracos na presença do potencial atrativo de uma impureza, vamos investigar as propriedades do sistema A^0 , composto por apenas um buraco ligado à impureza.

Para descrever a energia cinética do buraco utilizamos o Hamiltoniano H_{LK} , na forma como foi descrito na seção 3.2. Os efeitos de tensão são levados em conta (vide seção 2.2.b). Acrescentamos à energia cinética o potencial Coulombiano $V_{acp}(\rho, z) = -e^2/(\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + z^2})$, que descreve a interação buraco-impureza, e o potencial de confinamento $V_c(\rho, z)$:

$$H = H_{LK} + V_{acp}(\rho, z) + V_c(\rho, z) . \quad (4.2)$$

Utilizamos as autofunções

$$\langle \vec{x} | m, n, \nu, m_j \rangle = \frac{\sqrt{2}}{r |J_{m+1}(k_n^m r)|} J_m(k_n^m \rho) \cdot \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2}{\omega}} \begin{pmatrix} \cos(\pi z/w) & , \nu = 0 \\ \sin(2\pi z/w) & , \nu = 1 \end{pmatrix} |m_j \rangle \quad (4.3)$$

como base. Temos, então, a seguinte expressão para os elementos de matriz de V_{acp}

$$\langle m'_j, \nu', n', m' | V_{acp} | m, n, \nu, m_j \rangle = -\frac{2}{r} \int_0^\infty dQ G_{n,n'}^{m,m'}(Q) \chi_{m'_j}^{\nu', \nu}(Q \frac{w}{r}) \delta_{L'}^L \delta_{\sigma'}^\sigma , \quad (4.4)$$

onde $Q = qr$ e $\chi_{m'_j}^{\nu', \nu}$ é o fator de forma dado por

$$\chi_{m'_j}^{\nu', \nu}(Q \frac{w}{r}) = \int_{-\omega/2}^{\omega/2} dz \xi_{m'_j}^{\nu'}(z) \xi_{m_j}^\nu(z) e^{-q|z|} \delta_{\nu'}^\nu , \quad (4.5)$$

com $\xi^{\nu=0} = \sqrt{\frac{2}{\omega}} \cos(\pi z/\omega)$, $\xi^{\nu=1}(z) = \sqrt{\frac{2}{\omega}} \sin(2\pi z/\omega)$. O termo $G_{n,n'}^{m,m}(Q)$ descreve a interação buraco-impureza no plano do poço (x, y)

$$G_{n,n'}^{m,m}(Q) = \frac{2}{|J_{m+1}(k_n^m r) J_{m+1}(k_{n'}^m r)|} \int_0^1 s ds J_m(k_n^m r s) J_0(Q s) J_m(k_{n'}^m r s). \quad (4.6)$$

Nesse modelo consideramos uma impureza ideal localizada no centro do QD, o que preserva a simetria cilíndrica e faz com que o momento angular total, $L = m + m_j$, e a paridade, σ , continuem sendo bons números quânticos para este sistema (vide Eq. (4.4)). Na ausência de campos externos, o estado fundamental é duas vezes degenerado: $|L = \frac{3}{2}, N = 0, \sigma = \uparrow\rangle$ e $|L = -\frac{3}{2}, N = 0, \sigma = \downarrow\rangle$. Algumas das propriedades desse sistema são ilustradas para um QD cilíndrico formado pela liga $Si_{0.87}Ge_{0.13}$. Os parâmetros que caracterizam este material são os mesmos usados no capítulo anterior. A escala de energia dos gráficos é o Rydberg efetivo $Ry^{HH} = \frac{m_h^* e^4}{2\epsilon_0 \hbar^2}$, cuja massa efetiva corresponde a dos buracos pesados no plano, na aproximação axial: $m_h^* = m_0/(\gamma_1 + \gamma_2)$. $Ry^{HH} = 13.82 meV$, para a liga que forma o QD.

Na sequência analisamos a energia de ligação (E_{lig}) do aceitador neutro, definida como:

$$E_{lig} = |E^{A^0} - E^K|, \quad (4.7)$$

onde E^{A^0} é a energia do estado fundamental do aceitador (dada por (4.2)) e E^K a energia do buraco (dada por $H = H_{LK} + V_c$).

Consideremos um QD de raio $r = 200\text{\AA}$. A Fig. 4.1 apresenta valores de E_{lig} em função da espessura do disco. Para pequenos valores de ω , desprezando-se o acoplamento entre as bandas (linha tracejada), a energia de ligação do aceitador converge para $4Ry^{HH}$, como esperado para um sistema 2D-puro descrito por bandas de dispersão parabólicas. Isso mostra que o raio de 200\AA é maior que o raio efetivo do buraco ligado e as paredes do disco não afetam o resultado. Quando o acoplamento é levado em conta, observamos que a energia de ligação aumenta, pois o acoplamento entre os estados HH e LH aumenta a massa efetiva do buraco no estado fundamental, fazendo com que ele fique mais sujeito ao potencial atrativo da impureza. Pelo fato do potencial atrativo produzir estados ligados que são bastante localizados, a base usada para obtermos os espectros de A^0 e A^+ deve

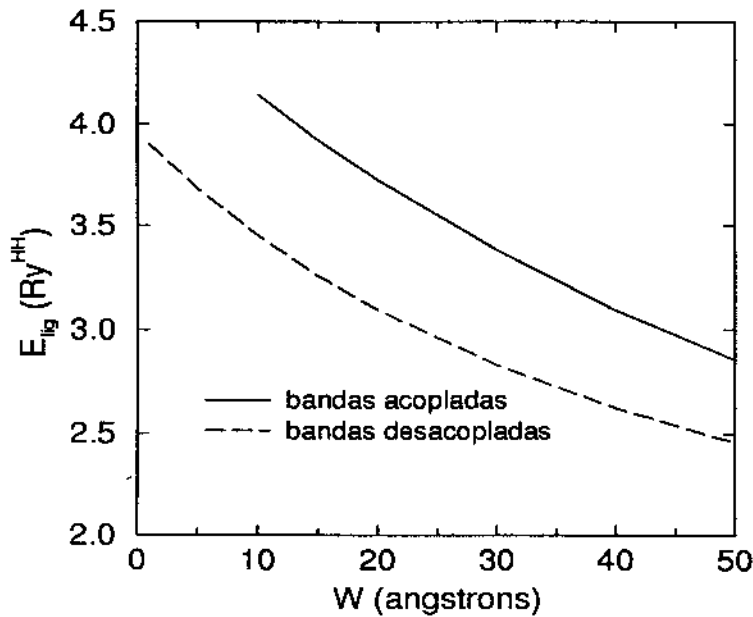


Figura 4.1: Energia de ligação do aceitador em função da espessura do poço. Sistema *quasi*-bidimensional, com $r = 200\text{\AA}$ e $Ry^{HH} = 13.82\text{meV}$.

conter um número bem maior de estados que aquela usada para descrever 1 ou 2 buracos dentro do QD sem a presença da impureza. Portanto, nos restringimos ao cálculo de aceitadores confinados na direção z por poços mais estreitos que o raio da órbita da impureza, dado que as funções de base para essa coordenada (HH_1 , LH_1 , HH_2 e LH_2) são insuficientes para descrever com rigor a função de onda do buraco localizado. Para estimarmos o erro de nossos resultados, calculamos a energia de ligação de aceitadores em poços quânticos de GaAs e as comparamos com resultados teóricos (Masselink *et al* 1985) e medidas experimentais (Boffety *et al* 1996). O erro é menor que 8% para poços com largura até 50\AA . Isso nos dá uma idéia do erro em nossos resultados para o *SiGe*. Por considerarmos paredes de potencial infinito nas fronteiras do disco, o cálculo não apresenta o resultado correto quando $\omega \rightarrow 0$, porque nesse limite a função de onda do buraco penetra significativamente na barreira, diminuindo sua energia de ligação (Masselink *et al* 1983).

O gráfico da Fig. 4.2 exhibe os efeitos de confinamento causados pela variação do raio do disco. Para esse caso mantemos sua espessura fixa: $\omega = 40\text{\AA}$. Como pode ser visto,

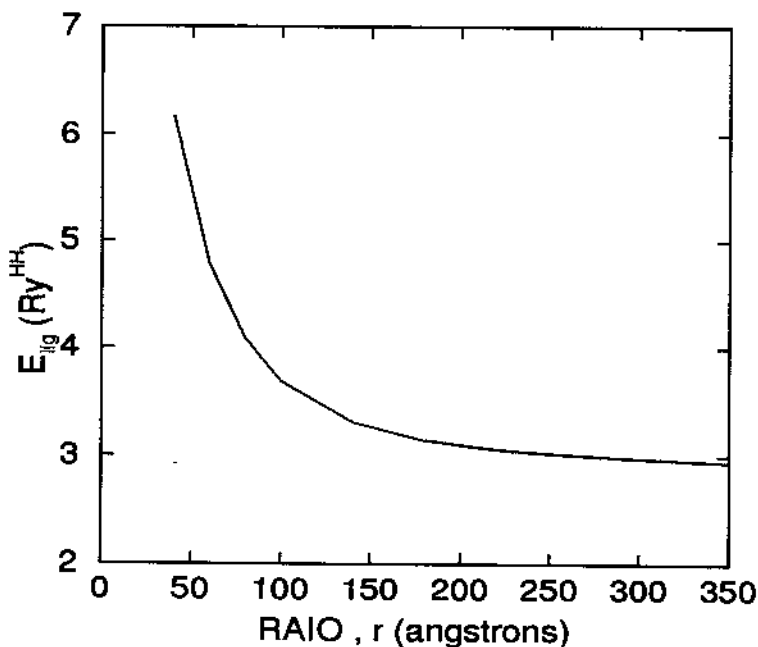


Figura 4.2: Energia de ligação do aceitador em função do raio do QD, com $\omega = 40\text{\AA}$ e $Ry^{HH} = 13.82\text{meV}$.

à medida que o raio do disco aumenta a energia de ligação do aceitador converge para o valor *quasi*-bidimensional, correspondente à curva de linha cheia do gráfico 4.1. Por outro lado, diminuindo-se o raio, o buraco é forçado a se aproximar da impureza, aumentando, assim, sua energia de ligação. Este limite corresponde a um confinamento efetivo nas três dimensões. Uma forte variação na energia de ligação ocorre para $r < 100\text{\AA}$, quando o raio do disco se aproxima do raio de Bohr do buraco pesado, $a_B^{HH} = 41.7\text{\AA}$. A energia de ligação do aceitador é máxima para uma impureza localizada no centro do QD. Estudos mostram que a energia de ligação diminui conforme a impureza se aproxima das paredes da heteroestrutura (Rune *et al* 1991, Masselink *et al* 1985), pois o potencial de confinamento tende a afastar a função de onda do buraco para longe da impureza.

Para analisarmos os efeitos causados por um campo magnético externo, consideramos um QD de raio $r = 200\text{\AA}$ e espessura $\omega = 40\text{\AA}$, com a impureza localizada em seu centro. A Fig. 4.3(a) mostra a energia total do aceitador em função de B . Vemos que o campo magnético quebra a degenerescência do estado fundamental, como acontece nos

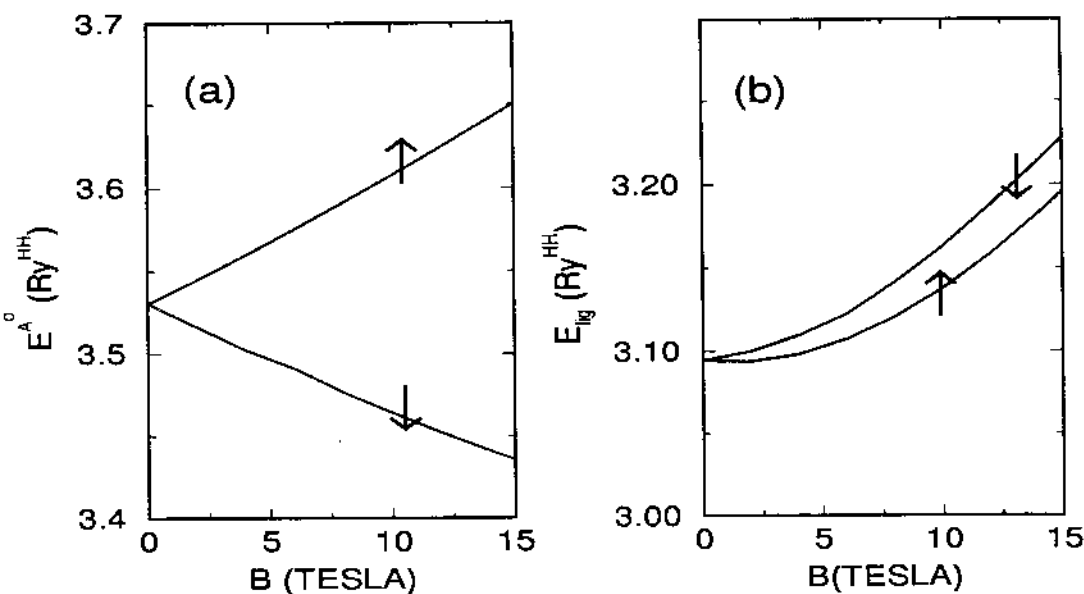


Figura 4.3: Energia total (E^A) e energia de ligação (E_{lig}) dos estados $|\frac{3}{2}, 0, \downarrow\rangle$ e $|\frac{3}{2}, 0, \uparrow\rangle$ em função do campo magnético; $r = 200\text{\AA}$, $\omega = 40\text{\AA}$ e $Ry^{HH} = 13.82\text{meV}$.

sistemas onde a impureza está ausente (vide Fig 3.1). Entretanto, a Fig. 4.3 revela que a energia do estado de paridade $\sigma = \downarrow$ decresce continuamente, ao contrário do que ocorre no sistema representado pela Fig. 3.1, onde o termo diamagnético domina o comportamento do sistema a altos campos e faz a energia do estado fundamental aumentar com B nesse limite. A presença da impureza está associada a este comportamento de duas formas. Primeiramente, a energia de ligação do aceitador cresce com a intensidade de B , ver Fig. 4.3(b), porque o potencial diamagnético gerado pelo campo confina a função de onda do buraco em uma órbita ciclotrônica, favorecendo a ligação à impureza e aumentando E_{lig} . O outro fator é consequência do aumento da massa efetiva do buraco de paridade \downarrow com o campo, como discutido no capítulo 3. O buraco com $\sigma = \uparrow$ é anômalo e sua massa praticamente não muda com o campo. A Fig. 4.3 demonstra que o estado $|\frac{3}{2}, 0, \downarrow\rangle$ tem energia de ligação maior que o estado $|\frac{3}{2}, 0, \uparrow\rangle$.

4.2.c O sistema A^+

O centro A^+ é obtido ao acrescentarmos mais um buraco ligado ao sistema A^0 . Temos, então, dois buracos interagentes na presença do potencial atrator de uma impureza aceitadora. Tendo em vista uma impureza ideal, o Hamiltoniano do sistema é

$$H = H_{LK} + V_c(\vec{x}_1) + V_c(\vec{x}_2) + V_{acp}(\vec{x}_1) + V_{acp}(\vec{x}_2) + V_{hh}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) , \quad (4.8)$$

onde V_{hh} identifica a interação Coulombiana entre os buracos, tratada em detalhe no capítulo anterior, V_c o potencial de confinamento e V_{acp} a interação dos buracos com o aceitador. Os efeitos de tensão são considerados.

Para melhor entendermos os autoestados de A^+ projetamos o Hamiltoniano (4.8) em duas bases distintas e comparamos seus resultados. No primeiro caso a base utilizada é composta por estados HH e LH desacoplados, Eq. (4.3). Vamos nos referir a esta base como *estados eletrônicos desacoplados*. No segundo usamos os autoestados do sistema A^0 como funções de base.

Com a intenção de investigarmos mais detalhadamente as propriedades do sistema A^+ , definimos duas energias diferentes. A energia de ionização (E_{ion}), definida como:

$$E_{ion} = \left| E_{GS}^{A^+} - (E_{GS}^{A^0} + E^K) \right| , \quad (4.9)$$

onde $E_{GS}^{A^+}$ é a energia do estado fundamental do Hamiltoniano (4.8); $E_{GS}^{A^0}$ e E^K definidas na seção anterior. Fora esta, a energia de ligação:

$$E_{lig} = \left| E_{GS}^{A^+} - E_{1^0}^{A^+} \right| , \quad (4.10)$$

onde $E_{1^0}^{A^+}$ representa o primeiro estado excitado de A^+ . A principal diferença entre ambas está no fato de que E_{ion} não leva em conta a interação entre o segundo buraco (livre, com energia E^K) e o centro A^0 , ao contrário do que ocorre com E_{lig} .

Na Figura 4.4 são exibidas E_{ion} (linha sólida) e E_{lig} (linha tracejada) para um sistema A^+ confinado em um QD de raio $r = 300\text{\AA}$ e espessura $\omega = 40\text{\AA}$. Os dados das Fig. 4.4(a) e (b) correspondem aos cálculos feitos usando-se as bases de *estados desacoplados* e de autoestados de A^0 , mencionadas acima. Os pontos localizados na origem dos eixos

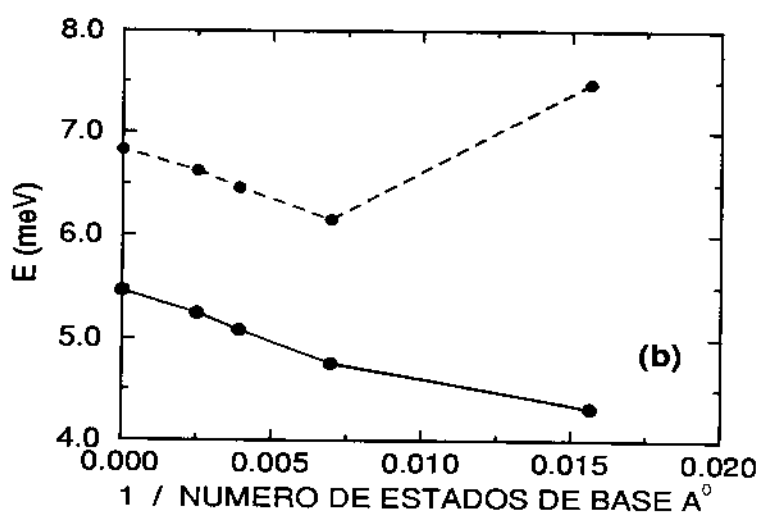
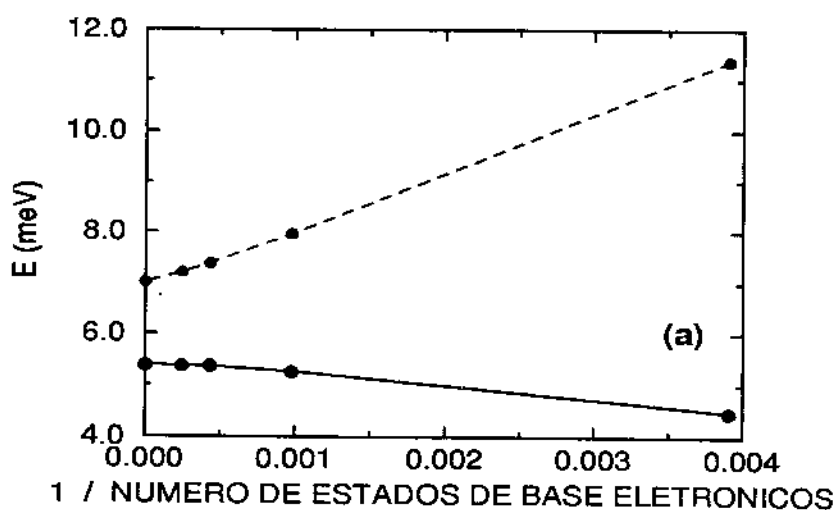


Figura 4.4: Energia de ionização E_{ion} (linha sólida) e energia de ligação E_{lig} (linha tracejada) calculadas usando-se: (a) base de *estados eletrônicos desacoplados* e (b) base de *autoestados* de A^0 . O primeiro ponto à esquerda, nos dois gráficos, foi obtido a partir dos demais por uma regressão polinomial.

das ordenadas foram obtidos por meio de uma regressão polinomial feita sobre os demais; supomos que esses pontos correspondem às soluções do Hamiltoniano (4.8) se calculadas em termos de uma base de dimensão infinita. Para ambas as bases as energias convergem para valores muito próximos: $E_{ion} = 5.38meV$ e $5.46meV$, $E_{lig} = 7.01meV$ e $6.83meV$. Analisando os gráficos da Fig. 4.4, segundo as equações (4.9) e (4.10), concluímos que o centro A^+ apresenta apenas um estado em que os dois buracos estão ligados ao aceitador, pois $E_{10}^{A^+} > (E_{GS}^{A^0} + E^K)$. Isso se deve, primeiro, à repulsão eletrostática entre os dois buracos. Além disso, há também, em relação ao estado A_{10}^+ , a blindagem que a função de onda do buraco mais ligado realiza sobre o potencial do aceitador. Na Fig. 4.4 representamos energias referentes ao estado fundamental de A^+ , cujo momento angular total $L_{total} = L_1 + L_2 = 0$; os estados com $L_{total} \neq 0$ não apresentam os dois buracos ligados ao aceitador. Essa propriedade diferencia o sistema A^+ de A^0 , visto que o último apresenta vários estados ligados.

A localização imposta pela impureza à função de onda dos buracos faz com que a base de estados A^0 seja mais apropriada para descrever as características do centro A^+ . Embora os valores de E_{lig} e E_{ion} coincidam para cálculos feitos usando-se as duas bases, um estudo das energias E^{A^+} revela que a base de autoestados de A^0 apresenta convergência bem mais rápida, sendo essa a base que utilizaremos em nossos cálculos.

Com a presença de um campo magnético externo podemos comparar os efeitos da interação Coulombiana dos buracos entre si e com a impureza. A Fig. 4.5 apresenta as energias $E_{GS}^{A^+}(L_{total} = 0)$, $E_{10}^{A^+}(L_{total} = 0)$ e $E^{A^+}(L_{total} = 1)$ em função do campo magnético. O estado fundamental tem configuração de paridades do tipo singlete e sua

energia é bem menor que a dos demais, em virtude da forte atração sobre o aceitador neste estado. O potencial atrativo faz com que o estado fundamental do sistema seja um singlete até campos magnéticos muito altos ($B \approx 10^4$). O efeito da repulsão entre os buracos torna-se visível nos estados de energia mais alta, que se cruzam conforme a intensidade de B aumenta. Como discutimos no capítulo anterior, o cruzamento dos níveis é uma característica da interação repulsiva entre as partículas. As configurações das paridades para cada um dos estados estão indicadas no gráfico [1].

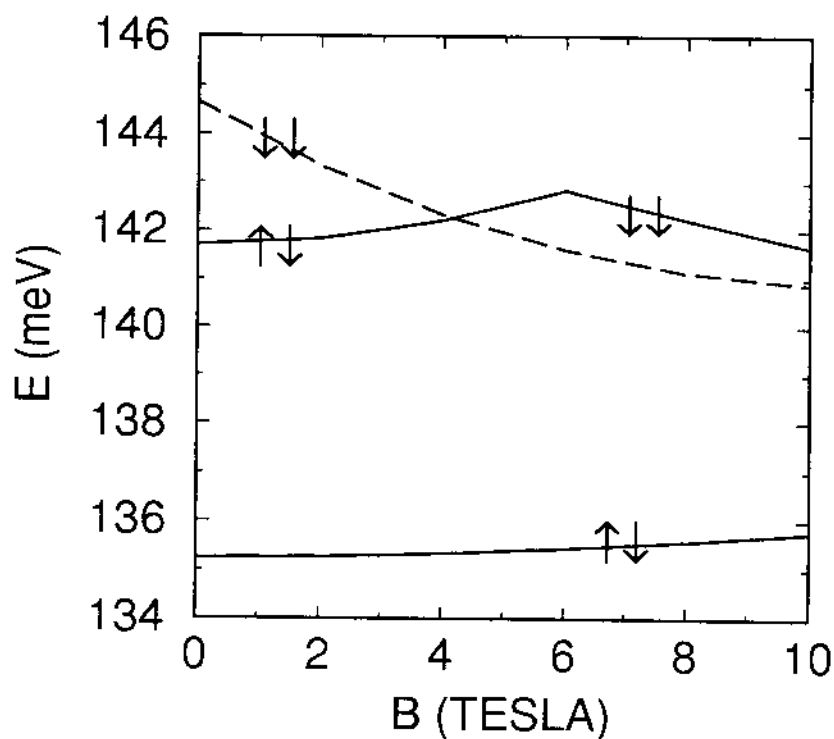


Figura 4.5: Energias do centro A^+ em função do campo magnético. A linha sólida corresponde aos estados de mais baixa energia com momento angular total $L_{total} = 0$. A linha tracejada representa o estado de mais baixa energia com $L_{total} = 1$.

representando o singlete, e $\downarrow\downarrow$, um dos componentes do tripleto.

4.3 Sumário

Neste capítulo discutimos a influência do potencial atrativo de uma impureza aceitadora no espectro de 1 e 2 buracos confinados em um QD. Verificamos que o acoplamento das bandas, o potencial de confinamento e a presença de um campo magnético externo têm como efeito aumentar a energia de ligação do buraco à impureza. Os resultados apresentam acordo qualitativo com os dados da literatura. Mesmo com as simplificações do modelo, comparações quantitativas feitas para a energia de ligação de aceitadores em poços quânticos de *GaAs/AlGaAs* revelaram um erro menor que 8% em nossos cálculos, para poços de até 50Å. Investigamos as propriedades dos estados de mais baixa energia do centro A^+ . Mostramos que esse sistema apresenta apenas um estado ligado e que o estado fundamental tem configuração de paridades do tipo singlete para campos magnéticos até 10T. O potencial atrativo do aceitador é o de maior influência sobre o estado fundamental, enquanto o potencial repulsivo entre os buracos tem maior efeito nos estados de maior energia.

Capítulo 5

Conclusões

Como salientamos ao longo deste trabalho, silício e germânio têm tido papel fundamental na física de semicondutores, desde o seu início. Atualmente, as ligas e nanoestruturas formadas por estes materiais são um campo de pesquisas que tem apresentado novos resultados e gerado bastante interesse, principalmente tecnológico. Esse interesse renovado tem sua origem nas heteroestruturas de $SiGe/Si$, com interfaces de boa qualidade e livre de deslocamentos e relaxações devidas à tensão. Com isso, a possibilidade de se utilizar esse tipo de estrutura na produção de dispositivos eletrônicos de alta velocidade, ópticos e opto-eletrônicos, compatíveis com a atual tecnologia de circuitos integrados, gerou uma grande motivação para as pesquisas nessa área. Assim sendo, essa foi uma das razões que nos levou a realizar um estudo das propriedades dos estados de valência em nanoestruturas de $Si_{1-x}Ge_x/Si$.

Investigamos o comportamento de buracos em poços quânticos dopados tipo-p. O Hamiltoniano de Luttinger-Kohn foi usado nesse e nos demais capítulos desta monografia como a ferramenta fundamental para descrever os estados da banda de valência nas proximidades do ponto Γ . A interação Coulombiana entre os buracos foi calculada auto-consistentemente em termos do potencial de Hartree, a $B = 0$. Parâmetros referentes a amostras de $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$, com $x = 12\%$ e 13% , foram usados em nossos cálculos. Verificamos a formação de um gás bidimensional de buracos na interface $Si/SiGe$ da amostra **CVD124**, dopada unilateralmente. A amostra com dopagem em ambos os lados do poço (**CVD121**) formou um gás *quasi*-bidimensional com densidade de portadores

máxima no centro do poço. A possibilidade de formação de dois gases bidimensionais independentes em cada uma das junções foi descartada para a concentração de portadores ($N_H = 3.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) e largura de poço ($\omega = 200 \text{ \AA}$). da amostra em questão. A massa efetiva ($m^* = 0.23m_0$ e $m^* = 0.21m_0$) da amostra **CVD121** foi calculada e o valor obtido apresenta bom acordo com os resultados experimentais da literatura. Na presença de um campo magnético, os buracos são descritos por combinações lineares de funções de onda de osciladores harmônicos. Os NL de mais baixa energia, com paridades opostas, apresentam comportamentos qualitativamente diferentes, pois os estados $\Psi^{l,n<0}$ são fracamente acoplados. Verificamos para as ligas de *SiGe* estudadas, que o acoplamento das bandas separa os estados de paridades opostas, da mesma maneira que o acoplamento Zeeman. Este comportamento gera um fator *g*-efetivo bastante alto, responsável pelo grande afastamento dos NL de paridades opostas e pela proximidade dos NL adjacentes que têm mesma paridade. Concluimos que esta é a razão pela qual as medidas de Efeito Hall Quântico apresentam, predominantemente, picos relacionados à fatores de preenchimento ímpares, enquanto que os pares são dificilmente observados. Calculamos teoricamente os intervalos de energia entre os NL e os comparamos com dados obtidos em medidas de magneto-transporte realizadas nas amostras **CVD121** e **CVD124**. A concordância foi boa para $\nu \geq 3$, mas pobre para os fatores de preenchimento mais baixos. As causas desse desacordo não foram determinadas, entretanto podemos considerar algumas possibilidades. Uma delas é o potencial de Hartree, que descreve a interação Coulombiana entre os buracos de forma semiclássica; a utilização de um potencial de Hartree-Fock ou de um formalismo de funcional de densidade local seriam uma alternativa para melhorar esta descrição. Também existe a possibilidade de o fator κ não ser constante para todos os valores de campo, ou ainda, se modificar quando o fator de preenchimento é baixo, devido a efeitos de interação de muitos corpos. Descartamos a possibilidade de erros nas medidas experimentais, pois os valores de energia medidos para $\nu = 2$ são grandes e as amostras apresentam alta pureza.

No segundo capítulo o enfoque foi dado à interação buraco-buraco. Usando o fato de que a paridade é um bom número quântico em heteroestruturas com simetria de inversão,

e que o spin deixa de sê-lo quando se acopla ao momento angular orbital nos estados de valência, desenvolvemos um modelo físico descrito por um Hamiltoniano cujo termo de interação buraco-buraco apresenta duas componentes: uma delas atua apenas na distribuição de cargas do sistema e a outra é capaz de modificar as paridades dos estados. Tratando a paridade analogamente ao spin temos, nesse novo modelo, um sistema de férmions sujeitos a uma interação Coulombiana dependente do spin. As simplificações feitas, como confinamento por barreiras de potencial infinito, exclusão de efeitos de tensão e da banda de estados *split-off* não devem mudar qualitativamente os resultados obtidos, pois apenas modificam a força do acoplamento das bandas. Caso considerássemos o *GaAs/AlGaAs* como material do QD estas aproximações seriam plenamente justificadas. Outra consideração feita foi eliminar a interação Zeeman do modelo. Esta poderia afetar qualitativamente os resultados, dependendo da concentração de *Ge* na liga, pois $\kappa_{Si} \approx -0.42$ e $\kappa_{Ge} \approx 3.4$. Ou seja, o termo Zeeman poderia reforçar ou eliminar os comportamentos apresentados a campos magnéticos finitos. Por isso preferimos desconsiderá-lo. O modelo teórico é válido para um número arbitrário de buracos, confinados em sistemas bi- e zero-dimensionais que apresentem simetria de inversão. Resultados numéricos foram apresentados para um conjunto de 2 buracos confinados em um QD cilíndrico. Como consequência desse novo potencial, estados com configurações de paridades $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$ apresentam acoplamento. Devido à mistura das bandas e a interação buraco-buraco, mostramos que o estado fundamental desse sistema não oscila entre configurações de paridade do tipo singleto e tripleto, como fazem os elétrons submetidos ao mesmo confinamento. A campos altos a configuração $|\downarrow\downarrow\rangle$ domina o estado fundamental.

Por fim, o terceiro capítulo pode ser considerado uma extensão do segundo. Nele investigamos os efeitos do potencial de uma impureza aceitadora ideal no comportamento de 1 e 2 buracos confinados. Muitos trabalhos estudaram cuidadosamente o espectro de energias de um aceitador neutro (A^0) em poços de *GaAs/AlGaAs*, teórica e experimentalmente. Muito poucos existem para heteroestruturas de *SiGe/Si*. Nanoestruturas de boa qualidade cristalina e interfaces sem rugosidades são necessárias para a boa definição experimental do espectro desses centros, e essas foram obtidas apenas recentemente. O

estudo de centros A^+ não foi realizado em heteroestruturas do grupo III-V ou IV. Como resultado desse estudo verificamos que o aceitador A^+ possui somente um estado ligado. A interação buraco-impureza é a mais importante para o estado fundamental, enquanto que a interação repulsiva buraco-buraco é a mais evidente nos comportamentos dos estados de mais alta energia, pois, nesses o buraco mais ligado blinda o potencial atrativo da impureza. Como perspectivas para esse trabalho, pretendemos considerar potenciais de confinamento mais realistas no cálculo do espectro de A^0 e usar tais resultados para estimar o erro que a aproximação de barreiras infinitas causa no espectro de absorção óptica de A^+ . Também pretendemos levar em conta a interação Zeeman, para compararmos resultados teóricos com medidas a campos magnéticos não nulos.

Apêndice A

O Hamiltoniano H_{LK} em coordenadas cilíndricas e seus elementos de matriz.

Neste apêndice apresentamos os operadores que compõem o Hamiltoniano de Luttinger-Kohn em coordenadas cilíndricas e a derivação de seus elementos de matriz.

Inicialmente, usamos o calibre simétrico para representar o potencial vetor $\vec{A}(\vec{r})$, que corresponde a um campo magnético aplicado paralelamente à direção z .

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{B}{2}(-y, x, 0), \quad \vec{B} = B\mathbf{e}_z. \quad (\text{A.1})$$

Para representarmos $\vec{A}(\vec{r})$ em termos das coordenadas (ρ, ϕ, z) , usamos as seguintes relações de transformação das componentes de um vetor:

$$A_\rho = A_x \cos(\phi) + A_y \sin(\phi) \quad (\text{A.2})$$

$$A_\phi = -A_x \sin(\phi) + A_y \cos(\phi), \quad (\text{A.3})$$

lembrando que $x = \rho \cos(\phi)$ e $y = \rho \sin(\phi)$. Desta forma escrevemos $\vec{A} = (A_\rho, A_\phi, A_z)$ como

$$\vec{A} = \frac{B}{2}(0, \rho, 0). \quad (\text{A.4})$$

Devido à presença do campo magnético, o momento cinético das partículas (\vec{p}) é substituído pelo momento generalizado $\vec{\Pi} = \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)$. Essa transformação não afeta o movimento da partícula na direção z . Entretanto, seu comportamento muda drasticamente no plano perpendicular à direção do campo. Para os novos operadores k_z^2 e k_r^2

escrevemos:

$$k_z^2 = -\partial_z^2 \quad (\text{A.5})$$

$$k_r^2 = -\left(\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho}\partial_\rho + \frac{1}{\rho^2}\partial_\phi^2\right) + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2 - \frac{\gamma}{i}\partial_\phi. \quad (\text{A.6})$$

onde $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*}$, $\omega_c = \frac{eB}{m_e^*c}$ é a frequência ciclotrônica e Ry^* é a energia de Rydberg eletrônica.

Os operadores $k_\pm = -i(\partial_x \pm i\partial_y)$ e k_\pm^2 também mudam. Aqui usamos as relações de transformação de diferenciais:

$$\partial_x = \cos(\phi)\partial_\rho - \frac{\sin(\phi)}{\rho}\partial_\phi \quad (\text{A.7})$$

$$\partial_y = \sin(\phi)\partial_\rho + \frac{\cos(\phi)}{\rho}\partial_\phi, \quad (\text{A.8})$$

para reescrever esses operadores. Dessa forma, levando em conta a definição (A.4), obtemos

$$k_- = \frac{e^{-i\phi}}{i\rho} \left[\rho\partial_\rho - i\partial_\phi - \frac{1}{2}\gamma\rho^2 \right] \quad (\text{A.9})$$

$$k_-^2 = e^{-2i\phi} \left\{ \frac{-1}{\rho^2} \left[\rho^2\partial_\rho^2 - \rho\partial_\rho - \partial_\phi^2 - 2i(\rho\partial_\rho - 1 - \frac{1}{2}\gamma\rho^2)\partial_\phi \right] - \frac{\gamma^2\rho^2}{4} + \gamma\rho\partial_\rho \right\}. \quad (\text{A.10})$$

A base na qual projetamos H_{LK} é formada pelos estados desacoplados

$$\langle \vec{x}|m, n, \nu, m_j \rangle = \frac{\sqrt{2}}{r|J_{m+1}(k_n^m r)|} J_m(k_n^m \rho) \cdot \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2}{\omega}} \begin{pmatrix} \cos(\pi z/w) & , \nu = 0 \\ \sin(2\pi z/w) & , \nu = 1 \end{pmatrix} |m_j \rangle. \quad (\text{A.11})$$

Ao calcularmos seus elementos de matriz obtemos as seguintes expressões, inicialmente para os operadores diagonais P_\pm

$$\begin{aligned} \langle m'n'\nu'|P_+|mn\nu \rangle &= \left\{ \delta_n^{n'} \left(\frac{k_{z,\nu}^2}{m_{zh}^*} + \frac{(k_n^m)^2 - m\gamma}{m_{rh}^*} \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{\gamma^2}{4m_{rh}^*} \langle m \ n'| \rho^2 | m \ n \rangle \right\} \delta_m^{m'} \delta_\nu^{\nu'} \delta_{m_j}^{m_j'} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \langle m'n'\nu' | P_- | mn\nu \rangle &= \left\{ \delta_n^{n'} \left(\frac{k_{z,\nu}^2}{m_{z,l}^*} + \frac{(k_n^m)^2 - m\gamma}{m_{r,l}^*} \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{\gamma^2}{4m_{r,l}^*} \langle m n' | \rho^2 | m n \rangle \right\} \delta_m^{m'} \delta_\nu^{\nu'} \delta_{m_j}^{m'_j}, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

com

$$\langle m n' | \rho^2 | m n \rangle = R^2 \frac{2}{|J_{m+1}(k_n^m R) J_{m+1}(k_n^m R)|} \int_0^1 x dx J_m(k_n^m R x) x^2 J_m(k_n^m R x). \quad (\text{A.14})$$

Os operadores não diagonais R e S geram os elementos de matriz

$$\begin{aligned} \langle m'n'\nu' | S | mn\nu \rangle &= -2\sqrt{3} \gamma_3 \frac{8}{3L} (-1)^\nu (1 - \delta_\nu^{\nu'}) \\ &\quad \left\{ \int_0^R d\rho J_{m'}'(k_{n'}^m \rho) \left[\rho \partial_\rho + m - \frac{1}{2} \gamma \rho^2 \right] J_m'(k_n^m \rho) \right\} \delta_{m-1}^{m'} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \langle m'n'\nu' | R | mn\nu \rangle &= -\sqrt{3} \gamma_{23} \delta_{m-2}^{m'} \delta_\nu^{\nu'} \left\{ \int_0^R d\rho J_{m'}'(k_{n'}^m \rho) \right. \\ &\quad \left. \left[(k_n^m)^2 \rho + \frac{2}{\rho} \left(1 - m + \frac{\gamma \rho^2}{2} \right) (\rho \partial_\rho + m) - \frac{\gamma^2 \rho^3}{4} \right] J_m'(k_n^m \rho) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

No entanto, com a intenção de facilitar seu uso, vamos reescrevê-los em termos de uma notação mais compacta. De início, para os elementos de matriz $\langle S \rangle$, aplicamos a propriedade das funções de Bessel

$$\frac{\partial J_m(k_n^m \rho)}{\partial \rho} = \frac{k_n^m}{2} [J_{m-1}(k_n^m \rho) - J_{m+1}(k_n^m \rho)] \quad (\text{A.17})$$

e obtemos

$$\begin{aligned} \langle m'n'\nu' | S | mn\nu \rangle &= -2\sqrt{3} \gamma_3 \frac{8}{3L} (-1)^\nu (1 - \delta_\nu^{\nu'}) \frac{2 R^{-2}}{|J_{m'+1}(k_{n'}^m R) J_{m+1}(k_n^m R)|} \\ &\quad \left\{ \int_0^R \rho d\rho J_{m'}'(k_{n'}^m \rho) \left[\frac{m}{\rho} + \frac{\gamma \rho}{2} \right] J_m(k_n^m \rho) + \right. \\ &\quad \left. \int_0^R \rho d\rho J_{m'}'(k_{n'}^m \rho) \frac{k_n^m}{2} [J_{m-1}(k_n^m \rho) - J_{m+1}(k_n^m \rho)] \right\} \delta_{m-1}^{m'} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

$$\langle m'n'\nu' | S | mn\nu \rangle = -2\sqrt{3} \gamma_3 \frac{8}{3L} (-1)^\nu (1 - \delta_\nu^{\nu'}) \{ A_{m'n'}^{mn}(R) + B_{m'n'}^{mn}(R) \} \delta_{m-1}^{m'}, \quad (\text{A.19})$$

onde $A_{m',n'}^{m,n}$ e $B_{m',n'}^{m,n}$ são definidos como

$$A_{m',n'}^{m,n}(R) \equiv \frac{2 R^{-1}}{|J_{m'+1}(k_{n'}^{m'} R) J_{m+1}(k_n^m R)|} \quad (\text{A.20})$$

$$B_{m',n'}^{m,n}(R) \equiv \frac{k_n^m}{|J_{m'+1}(k_{n'}^{m'} R) J_{m+1}(k_n^m R)|} \quad (\text{A.21})$$

$$\int_0^1 x dx J_{m'}(k_{n'}^{m'} R x) \left[\frac{m}{x} - \frac{\gamma R^2 x}{2} \right] J_m(k_n^m R x)$$

$$\int_0^1 x dx J_{m'}(k_{n'}^{m'} R x) [J_{m-1}(k_n^m R x) - J_{m+1}(k_n^m R x)] .$$

Partindo da expressão (A.17) escrevemos para os elementos de matriz $\langle R \rangle$

$$\langle m'n'\nu' | R | mn\nu \rangle = -\sqrt{3} \gamma_{23} \delta_{m-2}^{m'} \delta_{\nu}^{\nu'} \frac{2 R^{-2}}{|J_{m'+1}(k_{n'}^{m'} R) J_{m+1}(k_n^m R)|} \quad (\text{A.22})$$

$$\left\{ \int_0^R \rho d\rho J_{m'}(k_{n'}^{m'} \rho) \left[(k_n^m)^2 - \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + \frac{2m}{\rho^2} (1 - m - \frac{\gamma \rho^2}{2}) \right] J_m(k_n^m \rho) + \right.$$

$$\left. \int_0^R \rho d\rho J_{m'}(k_{n'}^{m'} \rho) \left[\frac{k_n^m}{\rho} (1 - m - \frac{\gamma \rho^2}{2}) \right] [J_{m-1}(k_n^m \rho) - J_{m+1}(k_n^m \rho)] \right\}$$

$$\langle m'n'\nu' | R | mn\nu \rangle = -\sqrt{3} \gamma_{23} \delta_{m-2}^{m'} \delta_{\nu}^{\nu'} \{ C_{m'n'}^{mn}(R) + D_{m'n'}^{mn}(R) \} , \quad (\text{A.23})$$

onde

$$C_{m'n'}^{mn}(R) \equiv \frac{2}{|J_{m'+1}(k_{n'}^{m'} R) J_{m+1}(k_n^m R)|} \int_0^1 x dx J_{m'}(k_{n'}^{m'} R x)$$

$$\left[(k_n^m)^2 - \frac{\gamma^2 R^2 x^2}{4} + \frac{2m}{x^2 R^2} (1 - m + \frac{\gamma R^2 x^2}{2}) \right] J_m(k_n^m R x) \quad (\text{A.24})$$

$$D_{m'n'}^{mn}(R) \equiv \frac{2}{|J_{m'+1}(k_{n'}^{m'} R) J_{m+1}(k_n^m R)|} \int_0^1 x dx J_{m'}(k_{n'}^{m'} R x)$$

$$\left[\frac{k_n^m}{R x} (1 - m + \frac{\gamma R^2 x^2}{2}) \right] [J_{m-1}(k_n^m R x) - J_{m+1}(k_n^m R x)] . \quad (\text{A.25})$$

Apêndice B

Elementos de Matriz do Hamiltoniano $H = H_0 + V_{hh}$

Este apêndice traz as expressões que descrevem o espalhamento de buracos devido ao campo magnético e à interação buraco-buraco, segundo o formalismo desenvolvido no capítulo 3.

Como destacamos na seção 3.2.c, as autofunções de H_{LK} na ausência de campo magnético formam a base em termos da qual obtemos os elementos de matriz do Hamiltoniano (3.11), escrito em segunda quantização. A equação $H_{LK}|L, N, \sigma\rangle = E|L, N, \sigma\rangle$ gera os estados $|j_i\rangle \equiv |L_i, N_i, \sigma_i\rangle$ escritos na forma

$$|L, N, \sigma\rangle = \sum_{m_j} \sum_n C_{n, m_j}^{L, N, \sigma} \frac{\sqrt{2}}{r|J_{m+1}(k_n^m r)|} \cdot \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \cdot \xi^\sigma(z) u_{m_j}(\mathbf{x}). \quad (\text{B.1})$$

Portanto, os efeitos do campo são incorporados em (3.11) sob a forma de um potencial espalhador de uma partícula. O campo magnético externo induz transições que conservam o momento angular (L) e a paridade (σ) dos buracos, individualmente. Tal propriedade pode ser facilmente entendida se lembrarmos que um campo magnético aplicado na direção z preserva duas simetrias importantes ligadas a esses números quânticos: a simetria cilíndrica, relacionada a L , e a simetria de reflexão em relação ao plano central do poço, relacionada a σ . Lembramos também que o campo $\vec{B} = B\vec{e}_z$ não influi no comportamento da partícula na direção z . Os elementos de matriz associados ao campo magnético, referentes aos operadores P_\pm , R e S são, respectivamente:

$$\langle \sigma' N' L' | U^{P_\pm} | L N \sigma \rangle = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 \pm \gamma_2) \sum_{m_j} \sum_{n, n'} C_{n', m_j}^{* L N' \sigma} C_{n, m_j}^{L N \sigma} \left\{ \frac{\Omega^2}{4} \langle n' m | \rho^2 | m n \rangle - \Omega m \delta_N^{N'} \right\} \delta_L^{L'} \delta_\sigma^{\sigma'}, \quad (\text{B.2})$$

$$\langle \sigma' N' L' | U^R | L N \sigma \rangle = \frac{\hbar^2}{2m_0} (-\sqrt{3}) \gamma_{23} \delta_L^{L'} \delta_\sigma^{\sigma'} \quad (\text{B.3})$$

$$\times \sum_{n,n'} \left\{ \sum_{m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} C_{n'(m_j+2)}^{*LN'\sigma} C_{n m_j}^{LN\sigma} \langle n' (m-2) | \left(\Omega m - \frac{\Omega^2 \rho^2}{4} + \Omega \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) | m n \rangle \right. \\ \left. + \sum_{m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}} C_{n'(m_j-2)}^{*LN'\sigma} C_{n m_j}^{LN\sigma} \langle n' (m+2) | \left(-\Omega m - \frac{\Omega^2 \rho^2}{4} + \Omega \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) | m n \rangle \right\},$$

$$\langle \sigma' N' L' | U^S | L N \sigma \rangle = \frac{\hbar^2}{2m_0} (2\sqrt{3}) \gamma_3 \left(\frac{-4\Omega}{3w} \right) \sigma \delta_L^{L'} \delta_\sigma^{\sigma'} \quad (\text{B.4})$$

$$\times \sum_{n,n'} \left\{ \sum_{m_j = -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} C_{n'(m_j+1)}^{*L N'\sigma} C_{n m_j}^{LN\sigma} \text{sgn}(m_j) \langle n' (m-1) | \rho | m n \rangle \right. \\ \left. - \sum_{m_j = -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} C_{n'(m_j-1)}^{*L N'\sigma} C_{n m_j}^{LN\sigma} \text{sgn}(m_j) \langle n' (m+1) | \rho | m n \rangle \right\},$$

onde $L = m + m_j$, $\sigma(\uparrow) \equiv 1$, $\sigma(\downarrow) \equiv -1$, $\Omega = l_B^{-2}$ e $l_B = (\hbar c / eB)^{\frac{1}{2}}$. A função $\text{sgn}(m_j)$ representa o sinal de m_j e os produtos escalares envolvendo os vetores $|m n\rangle$ são calculados em termos das funções de Bessel $J_m(k_n^m \rho)$.

A interação Coulombiana, por sua vez, é mais complexa e a obtenção de seus elementos de matriz demanda um grande tempo de computação numérica. Inicialmente, expandimos o potencial Coulombiano em termos de funções de Bessel

$$\frac{e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dq e^{il(\phi-\phi')} J^l(q\rho) J^l(q\rho') e^{-q|z-z'|}. \quad (\text{B.5})$$

Usando as funções de base $|j_i\rangle = |L_i, N_i, \sigma_i\rangle$ obtemos os elementos de matriz

$$\langle j_1 j_2 | V_{hh} | j_3 j_4 \rangle = \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \sum_{m_j^1} \sum_{m_j^2} \sum_{n^1, n^2, n^3, n^4} C_{n_1 m_j^1}^{*L_1 N_1 \sigma_1} C_{n_4 m_j^1}^{L_4 N_4 \sigma_4} C_{n_2 m_j^2}^{*L_2 N_2 \sigma_2} C_{n_3 m_j^2}^{L_3 N_3 \sigma_3} \\ \times \int_0^{\infty} dQ G_{n_1 n_4}^{L_1 L_4 m_j^1}(Q) G_{n_3 n_2}^{L_3 L_2 m_j^2}(Q) \chi_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{m_j^1 m_j^2} \left(Q \frac{w}{r} \right), \quad (\text{B.6})$$

onde ϵ_0 é a constante dielétrica estática do $\text{Si}_{0.87}\text{Ge}_{0.13}$ e r o raio do disco. Definimos G , que descreve a interação entre as densidades de carga no plano do disco:

$$G_{n n'}^{L L' m_j}(Q) = \frac{2 \int_0^1 s ds J_{L-m_j}(k_n^{L-m_j} r s) J_{L-L'}(q r s) J_{L'-m_j}(k_{n'}^{L'-m_j} r s)}{|J_{L-m_j+1}(k_n^{L-m_j} r) J_{L'-m_j+1}(k_{n'}^{L'-m_j} r)|} \quad (\text{B.7})$$

onde $Q = rq$ e $\rho = sr$.

O fator de forma $\chi_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4}^{m_j^1, m_j^2}$

$$\chi_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{m_j^1 m_j^2}(q) = \int_{-w/2}^{w/2} dz' \xi_{\sigma_2}^{m_j^2}(z') \xi_{\sigma_3}^{m_j^2}(z') \int_{-w/2}^{w/2} dz \xi_{\sigma_1}^{m_j^1}(z) \xi_{\sigma_4}^{m_j^1}(z) e^{-q|z-z'|} \quad (\text{B.8})$$

é o termo responsável pelo acoplamento entre as paridades. Para um poço de barreiras de potencial infinitas, soluções analíticas podem ser obtidas para (B.8), que evidenciam o acoplamento entre as diferentes paridades:

$$\chi_{0000}(q) = \frac{32\pi^4(q\omega + e^{-q\omega} - 1) + 20\pi^2(q\omega)^3 + 3(q\omega)^5}{(q\omega)^2[(2\pi)^2 + (q\omega)^2]^2} \quad (\text{B.9})$$

$$\chi_{1111}(q) = \frac{512\pi^4(q\omega + e^{-q\omega} - 1) + 80\pi^2(q\omega)^3 + 3(q\omega)^5}{(q\omega)^2[(4\pi)^2 + (q\omega)^2]^2} \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} \chi_{0110}(q) &= \chi_{1001}(q) = \\ &= \frac{128\pi^4(q\omega + e^{-q\omega} - 1) + 40\pi^2(q\omega)^3 + 2(q\omega)^5}{64\pi^4(q\omega)^2 + 20\pi^2(q\omega)^4 + (q\omega)^6} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

$$\chi_{0101}(q) = \chi_{0011}(q) = \chi_{1010}(q) = \chi_{1100}(q) \quad (\text{B.12})$$

$$= \frac{2(q\omega)[45\pi^6 - 64\pi^4(q\omega)(1 + e^{-q\omega}) + 59\pi^4(q\omega)^2 + 15\pi^2(q\omega)^4 + (q\omega)^6]}{[(3\pi)^2 + (q\omega)^2]^2 [\pi^2 + (q\omega)^2]^2}$$

$$\chi_{0111}(q) = \chi_{0100}(q) = \chi_{1101}(q) = \chi_{0001}(q) \dots = 0 \quad (\text{B.13})$$

O índice $\nu = 0, 1$, usado nas expressões acima, é equivalente à combinação dos índices m_j e σ (vide expressões 3.9 e 3.11) e corresponde as seguintes funções envelope na direção z :

$$\xi_{\nu=0}(z) = \sqrt{\frac{2}{\omega}} \cos\left(\frac{\pi z}{\omega}\right) \quad (\text{B.14})$$

$$\xi_{\nu=1}(z) = \sqrt{\frac{2}{\omega}} \sin\left(\frac{2\pi z}{\omega}\right) . \quad (\text{B.15})$$

Referências

- ^{1.} M. Altarelli, U. Ekemmmberg e A. Fasolino, *Calculations of hole subbands in semiconductor quantum wells and superlattices*, Phys. Rev. B **32**, p 5138, 1985.
- ^{2.} R. Apetz, R. Loo, L. Vescan, A. Hartmann, U. Zastrow, A. Leuther, T. Schäpers e H. Lüth, *Photoluminescence and magnetotransport of 2-D hole gases in Si/SiGe/Si heterostructures*, Solid State Elect. **37**, p 957, 1994.
- ^{3.} R. Apetz, L. Vescan, A. Hartmann, C. Dicker e H. Luth, *Photoluminescence and electroluminescence of SiGe dots fabricated by island growth*, Appl. Phys. Lett. **66**, p 445, 1995.
- ^{4.} M. Arafa, P. Fay, K. Ismail, J. Chu, B. Meyerson e I. Adesida, IEEE Electron Device Letters **17**, p 124, 1996.
- ^{5.} R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner, L. N. P. K. W. Baldwin e K. W. West, *N-Electron Ground State Energies of a Quantum Dot in Magnetic Field*, Phys. Rev. Lett. **71**, p 613, 1993.
- ^{6.} A. Baldereschi e N. O. Lipari, *Spherical Model of Shallow Acceptor States in Semiconductors*, Phys. Rev B **8**, p 2697, 1973.
- ^{7.} A. Baldereschi e N. O. Lipari, *Cubic contributions to the spherical model of shallow acceptor states*, Phys. Rev B **9**, p 1525, 1974.
- ^{8.} J. Bardeen e W. H. Brattain, *The Transistor, A Semi-Conductor Triode*, Phys. Rev. **74**, p 230, 1948.

9. G. Bastard, *Hydrogenic impurity states in a quantum well: a simple model*, Phys. Rev. B **24**, p 4714, 1981.
10. G. L. Bir e G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Willey, New York, 1974.
11. D. Boffety, A. Vasson, A.-M. Vasson, J. Leymarie, T. S. Cheng, C. A. Bates e J. M. Chamberlain, *Photoluminescence study of the Be acceptor at the center of GaAs / Ga_{0.67}Al_{0.33}As quantum wells with sizes in the range 28-300Å*, Semicond. Sci. Technol. **11**, p 340, 1996.
12. D. Broido e L. J. Sham, *Effective masses of holes at GaAs – AlGaAs heterojunctions*, Phys. Rev. B **31**, p 888, 1985.
13. D. A. Broido, A. Cross, e U. Rössler, *Theory of holes in quantum dots*, Phys. Rev. B **45**, p 11395, 1992.
14. P. N. Butcher, vol. 8 de *Physics of Solids and Liquids: Physics of Low-dimensional Semiconductor Structures*, pp 95–172, Plenum Press, New York, 1993.
15. J. P. Cheng, V. P. Kesan, D. A. Grützmacher e T. O. Sedgwick, *Cyclotron effective mass of holes in strained Si_{1-x}Ge_x/Si quantum well structures*, Surface Science **305**, p 275, 1993.
16. J. Cheng, V. Kesan, D. Grutzmacher e T. Sedgwick, Appl. Phys. Lett. **62**, p 1522, 1993.
17. A. Y. Cho, *Film deposition by molecular-beam techniques*, J. Vac. Sci. Technol. **8**, p S31, 1971.
18. P. T. Coleridge, P. Zawadzki, A. Sachrajda, R. Williams e H. Lafontaine, *The Hall insulator in 2-dimensional SiGe hole gases*, submetido para Phys.Rev. Lett.

19. T. Darnhofer, U. Rössler e D. A. Broido, *Far-infrared response of holes in quantum dots: Band structure effects and the generalized Kohn's theorem*, Phys. Rev. B **52**, p 14376, 1995.
20. R. B. Dunford, R. Newbury, V. A. Stadinick, F. F. Fang, R. G. Clark, R. H. MacKenzie, R. P. Starrett, E. E. Mitchel, P. J. Wang, J. O. Chu, K. E. Ismail e B. S. Meyerson, *Low temperature magneto-transport of 2D electron and hole systems in high mobility Si - Si_{1-x}Ge_x heterostructures*, Proceedings de uma conferência, p 448.
21. L. Esaki e R. Tsu, IBM Res. Note **RC**, p 2418, 1969.
22. F. F. Fang, P. J. Wang, B. S. Meyerson, J. J. Nocera e K. E. Ismail, *Two-dimensional hole gas in Si/SiGe heterostructures*, Surface Science **263**, p 175, 1992.
23. T. Fromherz, E. Koppenstein, M. Helm, G. Bauer, J. Nutzel e G. Abstreiter, *Hole energy and intersubband absorption in modulation-doped Si/Si_{1-x}Ge_x multiple quantum well*, Phys. Rev. B **50**, p 15073, 1994.
24. Y. Guldner, J. M. Berroir, J. P. Vieren, M. Voos, I. Sagnes, P. A. Badoz, P. Warren e D. Dutartre, *Investigation of two-dimensional hole gases in Si/SiGe heterostructures*, Phys. Rev. B **48**, p 12312, 1993.
25. E. E. Haller e F. S. Goulding, vol. 4 de *Handbook on Semiconductors*, pp 937-963, Elsevier, New York, 1993.
26. P. Hawrylak, N. Pulsford e K. Ploog, *Magneto-optics of acceptor-doped GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs heterostructures in the quantum Hall regime: resonant magnetoexcitons and many-electron effects*, Phys. Rev. B **46**, p 15593, 1993.
27. D. Houghton, G. Aers, S. E. Yang, E. Wang e N. Rowell, *Type I Band Alignment in Si_{1-x}Ge_x/Si(001) Quantum Wells: Photoluminescence under Applied [110] and [100] Uniaxial Stress*, Phys. Rev. Lett. **75**, p 866, 1995.

28. E. O. Kane, vol. 1 de *Semiconductors and Semimetals: The $\vec{k}\cdot\vec{p}$ model*, Academic Press, New York, 1966.
29. E. Kasper, em *Properties of Strained and Relaxed Silicon Germanium*, vol. 12 de *Topics in Applied Physics*, INSPEC, New York, 1975.
30. M. A. Kastner, *Rev. Mod. Phys.* **64**, p 849, 1992.
31. A. Katsky, S. Luryi, J. C. Bean e T. T. Sheng, *Proc. 1st Int. Symp. Silicon MBE*, p 406, 1985.
32. C. Kittel e H. Mitchell, *Theory of Donor and Acceptor States in Silicon and Germanium*, *Phys. Rev* **96**, p 1488, 1954.
33. W. Kohn e D. Schechter, *Theory of Acceptor Levels in Germanium*, *Phys. Rev* **99**, p 1903, 1955.
34. C. S. Lent, *Edge states in circular quantum dots*, *Phys. Rev. B* **43**, p 4179, 1991.
35. D. J. Lockwood, Z. H. Lu e J. M. Baribeau, *Quantum Confined Luminescence in Si/SiO₂ Superlattices*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, p 539, 1996.
36. S. Luryi, A. Katsky e J. C. Bean, *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-31**, p 1135, 1984.
37. J. M. Luttinger, *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*, *Phys. Rev.* **102**, p 1030, 1956.
38. J. M. Luttinger e W. Kohn, *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*, *Phys. Rev.* **97**, p 869, 1955.
39. O. Madelung, em K. H. Hellwege, editor, *Semiconductors, Physics of Group IV and III-V Compounds*, vol. III/17a de *Landolt&Bernstein*, Springer Verlag, Berlin, 1987.
40. P. A. Maksym e T. Chakraborty, *Effect of electron-electron interactions on the magnetization of quantum dots*, *Phys. Rev. B* **45**, p 1947, 1992.

41. R. W. Martin, R. J. Nicholas, G. J. Rees, S. K. Haywood, N. J. Mason e P. J. Walker, *Two-dimensional spin confinement in strained-layer quantum wells*, Phys. Rev. B **42**, p 9237, 1990.
42. W. T. Masselink, Y.-C. Chang e H. Morkoc, *Binding energies of acceptors in GaAs – Al_xGa_{1-x}As quantum wells*, Phys. Rev. B **28**, p 7373, 1983.
43. W. T. Masselink, Y.-C. Chang e H. Morkoc, *Acceptor spectra of Al_xGa_{1-x}As/GaAs quantum wells in external fields: Electric, magnetic, and uniaxial stress*, Phys. Rev. B **32**, p 5190, 1985.
44. P. L. McEuen, E. B. Foxman, U. Meirav, M. A. Kastner, Y. Meier, N. S. Wingreen e S. J. Wind, *Transport Spectroscopy of a Coulomb Island in the Quantum Hall Regime*, Phys. Rev. Lett. **66**, p 1926, 1991.
45. R. Nötzel, *Self-organized growth of quantum-dot structures*, Semicond. Sci. Technol. **11**, p 1365, 1996.
46. J. F. Nützel, F. Meier, E. Friess e G. Abstreiter, *Boron-doped Si/Ge superlattices and heterostructures*, Thin Solid Films **222**, p 150, 1992.
47. J. J. Palacios e P. Hawrylak, *Correlated few-electrons states in vertical double-quantum-dot systems*, Phys. Rev. B **51**, p 1769, 1995.
48. T. P. Pearsall, vol. 33 de *Semiconductors and Semimetals: Strained Layer Superlattices: Materials Science and Technology*, Academic Press, New York, 1991.
49. F. B. Pedersen e Y.-C. Chang, *Energy levels of one and two holes in parabolic quantum dots*, Phys. Rev. B **53**, p 1507, 1996.
50. F. M. Peeters e A. Schweigert, *Two-electron quantum dots*, Phys. Rev. B **53**, p 1, 1996.
51. R. People, *Physics and Applications of Ge_xSi_{1-x}/Si Strained-Layer Heterostructures*, IEEE J. Quant. Elect. **QE-22**, p 1696, 1984.

52. L. G. C. Rego, P. Hawrylak, J. A. Brum e A. Wojs, *Capacitance Spectroscopy of interacting valence holes in p-SiGe disks in a magnetic field*, submetido para publicação em Phys. Rev. B, , 1996.
53. A. V. Rodina, *A⁺ center and exciton bound to neutral acceptor in diamond-like semiconductors*, Solid State Commun. **85**, p 23, 1993.
54. G. Rune, P. O. Holtz, M. Sundaram, J. L. Merz, A. C. Gossard e B. Monemar, *Dependence of the binding energy of the acceptor on its position in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum well*, Phys. Rev. B **44**, p 4010, 1991.
55. W. Schmit, *Density-functional calculations for quasi-two-dimensional hole gases*, Phys. Rev. B **50**, p 15221, 1994.
56. P. C. Sercel e K. J. Valhala, *Analytical formalism for determining quantum-dot band structure in a multiband envelope-function approximation*, Phys. Rev. B **42**, p 3690, 1990.
57. C. Sikorski e U. Merkt, *Spectroscopy of Electronic States in InSb Quantum Dots*, Phys. Rev. Lett. **62**, p 2164, 1989.
58. S. H. Song, D. C. Tsui e F. F. Fang, *Cyclotron mass of two-dimensional holes in strained Si/Si_{0.88}Ge_{0.12}/Si Heterostructures*, Solid State Commun. **96**, p 61, 1995.
59. H. L. Störmer, R. Dingle, A. C. Gossard, W. Wiegmann e M. D. Sturge, *Two-dimensional electron gas at a semiconductor-semiconductor interface*, Solid State Commun. **29**, p 705, 1979.
60. T. Chakraborty, *Physics of artificial atoms: quantum dots in a magnetic field*, Comments in Cond. Matter Physics **16**, p 35, 1992.
61. M. Tewordt, L. Martin-Moreno, J. T. Nichols, M. Pepper, M. J. Kelly, V. J. Law, D. A. Ritchie, J. E. F. Frost e G. A. C. Jones, *Single-electron tunneling and Coulomb*

- charging effects in asymmetric double-barrier resonant-tunneling diodes*, Phys. Rev. B **45**, p 14407, 1992.
- ^{62.} K. J. Valhala e P. C. Sercel, *Applications of a Total-Angular-Momentum Basis to Quantum-Dot Band Structure*, Phys. Rev. Lett. **65**, p 239, 1990.
- ^{63.} M. Wagner, U. Merket e A. V. Chaplik, *Spin-singlet-spin-triplet oscillations in quantum dots*, Phys. Rev. B **45**, p 1951, 1992.
- ^{64.} T. E. Whall, N. L. Matthey, A. D. Plews, P. J. Phillips, O. A. Mironov, R. J. Nicholas e M. J. Kearney, *Effective mass and quantum lifetime in a Si/Si_{0.87}Ge_{0.13}/Si two-dimensional holes gases*, Appl. Phys. Lett. **64**, p 357, 1994.
- ^{65.} S. Wong, D. Kinder, R. Nicholas, T. Whall e R. Kubiak, *Cyclotron-resonance measurements on p-type strained layer Si_{1-x}Ge_x/Si heterostructures*, Phys. Rev. B **51**, p 13499, 1995.
- ^{66.} Y. H. Xie, E. A. Fitzgerald, D. Monroe, P. J. Silverman e G. P. Watson, *Fabrication of high mobility two-dimensional electron and hole gases in GeSi/Si*, J. Appl. Phys. **73**, p 8364, 1993.
- ^{67.} P. Y. Yu e M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Springer, Berlin, 1996.